

Ein Beitrag zur Entwicklung von winkelauflösenden
Streulichtsensoren für die Oberflächencharakterisierung

Vom Fachbereich Maschinenbau der Universität der Bundeswehr Hamburg
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs genehmigte

DISSERTATION

vorgelegt von
Dipl.-Ing. André Kasper
aus Leipzig

Hamburg 2000

DISTRIBUTION STATEMENT A
Approved for Public Release
Distribution Unlimited

BEST AVAILABLE COPY

Ein Beitrag zur Entwicklung von winkelauflösenden
Streulichtsensoren für die Oberflächencharakterisierung

Vom Fachbereich Maschinenbau der Universität der Bundeswehr Hamburg
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs genehmigte

DISSERTATION

vorgelegt von
Dipl.-Ing. André Kasper
aus Leipzig

Hamburg 2000

AQ F04-12-1694

Tag der mündlichen Prüfung: 6. Oktober 2000

Hauptreferent:

Herr Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. H. Rothe, Universität der Bundeswehr Hamburg

Korreferent:

Herr Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. H. Truckenbrodt, Technische Universität Ilmenau

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Automatisierungstechnik der Universität der Bundeswehr Hamburg.

Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. H. Rothe danke ich herzlich für die Anregung und intensive Förderung zu dieser Arbeit, für die Übernahme des Hauptreferates, für die wertvollen Diskussionen sowie für fachliche und persönliche Hilfestellungen.

Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. H. Truckenbrodt danke ich für die Übernahme des Korreferates, seinem Interesse an meiner Arbeit sowie für die fachlichen Anregungen auf dem Gebiet der Streulichtmeßtechnik.

Weiterhin danke ich all jenen Mitarbeitern des Instituts für Automatisierungstechnik, die durch ihre Mithilfe und Interesse zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. An dieser Stelle möchte ich insbesondere Frau Dr. D. Hüser und Herrn T. Rinder für die fachlichen Diskussionen und die Unterstützung im Labor dankend erwähnen. Dem ehemaligen Studenten Herrn U. Schael, der mich im Rahmen seiner Diplom- und Studienarbeit unterstützt hat, danke ich ebenfalls.

Mein ganz besonderer Dank gilt meiner Frau Jana und meinen Kindern Florentine und Janes für ihre unerschöpfliche Geduld und ihr Verständnis, insbesondere während der Endphase meiner Promotion.

Hamburg, im Dezember 2000

André Kasper

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Stand der Kenntnisse	9
2.1	Streulichttheorien	9
2.2	Streulichtmeßgeräte, Streulichtsensoren	11
2.3	Standards	15
3	Zielsetzung der Arbeit	17
4	Theoretische Grundlagen	19
4.1	Beschreibung von Oberflächentopographien durch Kenngrößen	19
4.2	Radiometrisches Erfassen der Lichtstreuung	26
4.3	Modellierung der Lichtstreuung an glatten Oberflächen	30
4.4	Modellierung der Lichtstreuung an Partikeln	33
4.5	Analyse der Lichtstreuung durch Mustererkennung	37
4.5.1	Statistische Momente als Merkmale der Streulichtverteilung	38
4.5.2	Zirkulare Momente als Merkmale der Streulichtverteilung	38
4.5.3	Modellbasierte Merkmale der Streulichtverteilung	40
4.5.4	Merkmalsgewinnung durch Splineapproximation	42
5	Entwicklung zweier winkelauflösender Streulichtsensoren	46
5.1	Anforderungen und Konzeption	46
5.2	Allgemeine Detektoreigenschaften	47
5.3	Faseroptischer Streulichtsensor	50
5.3.1	Aufbau	50
5.3.2	Kopplung Wellenleiter-Detektor	52

5.3.3	Radiometrisches Modell	55
5.3.4	Modell der Winkel- und Ortsfrequenzauflösung	56
5.3.5	Kalibrierung	57
5.3.6	Theoretische Betrachtungen zu den Eigenschaften des faseroptischen Sensors	59
5.4	Planarer Streulichtsensor	63
5.4.1	Aufbau	63
5.4.2	Radiometrisches Modell	65
5.4.3	Modell der Winkel- und Ortsfrequenzauflösung	68
5.4.4	Kalibrierung und Korrekturverfahren	70
5.4.5	Theoretische Betrachtungen zu den Eigenschaften des ebenen Streulichtsen- sors	72
6	Meßaufbau	76
6.1	Rasterkraftmikroskop	77
6.2	Gerätesteuerung	79
7	Experimente	82
7.1	Kalibrierung des faseroptischen Streulichtsen- sors	82
7.2	Kalibrierung des planaren Streulichtsen- sors	88
7.3	Vergleich von Topographie- und Streulicht- messungen an glatten Oberflächen	93
7.4	Rasterscans zur Detektion von Partikeln	97
7.5	Experimenteller Vergleich von Streulicht- merkmalen	101
8	Zusammenfassung und Ausblick	107
	Literaturverzeichnis	110
	Symbolverzeichnis	117
A	Klassifikationsverfahren: Diskriminanzanalyse	122
B	Verwendete Proben	125
C	Merkmalskurven	126

Kapitel 1

Einleitung

Zur Qualitätsprüfung von Oberflächen haben sich Streulichtverfahren als besonders leistungsfähig erwiesen [49, 85]. Streulichtverfahren arbeiten berührungslos, prüfen einen flächenhaften Ausschnitt der Oberfläche und reagieren äußerst empfindlich auf kleinste Oberflächenstrukturen. Mit Streulichtverfahren können Oberflächenstrukturen über mehrere Größenordnungen hinweg, von atomarer Größe bis hin zu langwelligen Topographieanteilen, nachgewiesen werden. Die erreichbare hohe Nachweisempfindlichkeit und Meßgeschwindigkeit von Streulichtverfahren sind geradezu ideal für routinemäßige zerstörungsfreie Qualitätskontrollen.

Streulichtverfahren basieren auf der Messung der infolge der Bestrahlung eines Oberflächenausschnittes auftretenden Lichtstreuung. Im allgemeinen wird für die Bestrahlung der Oberfläche eine kohärente monochromatische Lichtquelle benutzt. Führt man die Streuung auf eine Interaktion der einfallenden elektromagnetischen Strahlung mit der Oberflächentopographie zurück, kann durch Lösen des inversen Streuproblems¹ von der beobachteten Streuverteilung auf Kenngrößen der Oberflächentopographie geschlossen werden. Eine Messung der Streuintensitäten und ggf. auch deren Polarisation kann sowohl winkelauflösend als auch integral über einen bestimmten Bereich der Hemisphäre erfolgen.

Für die on-line Prüfung von technischen Oberflächen mit Hilfe von Streulichtverfahren ist kommerziell derzeit keine geeignete Sensorik verfügbar. Aufgabe einer solchen Sensorik wäre die schnelle winkelauflösende radiometrische Messung von Streuintensitäten über einen Dynamikbereich von mehreren² Dekaden.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es daher, eine für die schnelle winkelauflösende Streulichtmessung geeignete Sensorik zu realisieren, diese metrologisch zu charakterisieren und deren Leistungsfähigkeit zur Oberflächenprüfung nachzuweisen. Es werden sowohl ein faseroptischer Streulichtsensor nach einem Patent von *Rothe* und *Riedel* [76] weiterentwickelt, als auch ein neuartiger planarer Streulichtsensor entwickelt. Einen weiteren Schwerpunkt stellen Untersuchungen von verschiedenen Ansätzen zur Lösung des inversen Streuproblems dar.

In **Kapitel 2** wird der Stand der Kenntnisse auf dem Gebiet der Streulichtsensorik und

¹Der Rückschluß von der Streuung auf die verursachende Struktur bedeutet in diesem Zusammenhang nicht, daß die Topographie im Ortsraum bestimmt werden kann.

²Scatterometer erreichen einen Dynamikbereich von bis zu 15 Dekaden.

der Streulichtanalyseverfahren aufgezeigt. Es werden verschiedene radiometrische Meßgeräte und Sensoranordnungen vorgestellt. Weiterhin wird ein Überblick über den aktuellen Stand der Analyseverfahren für Streulichtmessungen gegeben.

Resultierend aus dem Stand der Technik wird in **Kapitel 3** die Zielsetzung der Arbeit präzisiert.

Kapitel 4 beschäftigt sich mit den theoretischen Grundlagen der Streulichtsensorik. Zunächst werden die für einen Vergleich zwischen Streulichtmessungen und profilometrischen Messungen notwendigen Oberflächenkenngrößen erläutert. Nach der Definition radiometrischer Meßgrößen zur Streulichtmessung werden verschiedene Streulichttheorien vorgestellt, sowie Möglichkeiten der Anwendung von Mustererkennungsverfahren aufgezeigt. Hierbei werden bereits bekannte Merkmale zur Charakterisierung von Streulichtverteilungen als auch im Rahmen der Arbeit entstandene Merkmale definiert.

In **Kapitel 5** werden die realisierten Sensoren erläutert und die für eine metrologische Charakterisierung notwendigen Sensormodelle abgeleitet.

Der Messaufbau wird in **Kapitel 6** beschrieben.

Kapitel 7 widmet sich den im Rahmen der Arbeit durchgeführten experimentellen Untersuchungen. Zunächst wird dabei auf die Sensorkalibrierung und die radiometrische Charakterisierung der Streulichtsensoren eingegangen. Anschließend werden anhand von Vergleichsmessungen zwischen Streulichtmessungen und profilometrischen Messungen an polierten Stahloberflächen die Möglichkeiten der Messung von Oberflächenkenngrößen mit Streulicht analysiert. Einen weiteren Schwerpunkt stellt der experimentelle Nachweis von Defekten dar, deren Ausdehnung kleiner als die Wellenlänge des eingestrahlteten Lichtes ist. Abschließend wird die Eignung der vorgestellten Streulichtmerkmale zur mustererkennungsbasierten Charakterisierung technischer Oberflächen analysiert.

Die Erkenntnisse der Arbeit werden in **Kapitel 8** zusammengefaßt. Der darin enthaltene **Ausblick** zeigt Möglichkeiten für zukünftige Arbeiten im Bereich der Streulichtsensorik auf, und soll Anregung für die Entwicklung weiterführender Analyseverfahren geben.

Kapitel 2

Stand der Kenntnisse

In der vorliegenden Arbeit werden ingenieurwissenschaftliche Aspekte der Streulichtsensorik behandelt. Der Ursprung der Streulichtanalyse liegt in der physikalischen Betrachtung der Streuung von elektromagnetischen Wellen an Oberflächen und Partikeln. Dementsprechend wird in dem folgenden Kapitel zunächst der Stand der Kenntnisse auf dem Gebiet der Streulichtmodellierung umrissen. Auf die im Rahmen dieser Arbeit angewandten Streulichtapproximationen und die physikalischen Grundlagen der Streulichttheorie wird gesondert in Kapitel 4.3 eingegangen. Alternativ zu den physikalischen Betrachtungen zur Streuung des Lichtes soll der Stand der Forschungen auf dem Gebiet der Mustererkennung von Streulichtverteilungen analysiert werden. Anschließend wird auf die technischen Belange der Streulichtmessung eingegangen und der Stand der Meßtechnik auf diesem Gebiet aufgezeigt.

2.1 Streulichttheorien

Aus historischer Sicht hat sich bereits *Da Vinci* um 1500 mit dem Thema Streulicht auseinandergesetzt, als er der Frage nach der Ursache für die blaue Farbe des Himmels nachging. Um 1870 hat *Tyndall* mit dem von kleinsten Kugeln und Aerosolen ausgehenden Streulicht experimentiert, woraus schließlich die theoretische Arbeit *Rayleighs* (1871) resultierte. Die Arbeit *Rayleighs* beschreibt die Streuung des Lichtes an im Vergleich zur Wellenlänge des Lichtes kleinen Kugeln. Diese Theorie wurde von *Mie* (1908) für beliebige Kugelgrößen und beliebige Brechungsindizes verallgemeinert. Neben der Streuung an Partikeln und Aerosolen hat man sich mit der Entwicklung der Radartechnik verstärkt mit der Streuung an Oberflächen auseinandergesetzt. Für die Streuung von elektromagnetischen Wellen an Oberflächen gibt es eine ganze Reihe von Untersuchungen auf den unterschiedlichsten Gebieten der Physik. Hierbei wird im allgemeinen von elastischer Streuung ausgegangen, d.h. die Wellenlänge der gestreuten Strahlung ist gleich der Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Von *Davies* [23] wurde 1954 ein Zusammenhang zwischen dem Streulichtintegral (TIS - *Total Integrated Scattering*) und der Oberflächenrauheit R_q in Verbindung mit der Untersuchung der Streuung von Radarwellen an der Meeresoberfläche publiziert. Der Ansatz beruht auf einer skalaren Approximation der Beugungsintensitäten und ist nur für kleine

Streuwinkel und glatte Oberflächen ($\lambda \gg 4\pi R_q$) gültig¹.

Die Streuung an glatten Oberflächen wurde von *Rayleigh* (1907) analysiert und später von *Rice* (1951) und *Barrick* (1970) in der Radar-Literatur als vektorielle Streutheorie, d.h. unter Berücksichtigung der Polarisierung, vorgestellt. Die als *Rayleigh-Rice vector perturbation theory* oder auch *vector theory* bekannte Streutheorie wurde von *Church et. al.* [19–21], basierend auf den Beugungsberechnungen *Rayleighs*, in der Optik eingeführt. Beruhend auf der Fernfeldapproximation der Streuerverteilung an einer glatten Oberflächentopographie stellt die *Rayleigh-Rice* (RR) Theorie einen Zusammenhang zwischen Streulichtverteilung und spektraler Leistungsdichtefunktion (PSD) der Oberflächentopographie dar. Somit ist im Rahmen der Gültigkeit der RR-Theorie eine Lösung des inversen Streulichtproblems in Bezug auf die aus der PSD berechenbaren statistischen Oberflächenkenngrößen gegeben. Basierend auf diesem Zusammenhang vergleicht beispielsweise *Jakobs* [45] topographische AFM-Messungen mit ARS-Streulichtmessungen an optischen Schichten.

Beckmann und *Spizzichino* (1963) [9] untersuchten die Streuung an rauen Oberflächen [9] mit Hilfe von skalaren (ohne Berücksichtigung der Polarisierung) Streulichtapproximationen. Der von *Beckmann* und *Spizzichino* hergeleitete Zusammenhang zwischen der Oberflächenstatistik von rauen stochastischen Oberflächen und der Verteilung der Streuintensitäten ist aufgrund des enthaltenen Quotienten aus Korrelationslänge und quadratischer Mittenrauheit mehrdeutig und läßt bei einer Inversion keine separate Berechnung der Rauheit oder der Korrelationslänge aus der Streulichtverteilung zu. Dieser Ansatz läßt daher nur eine Berechnung der Streuintensitäten für eine gegebene Oberfläche zu und bietet keine Möglichkeit zur Lösung des inversen Streuproblems für raue Oberflächen. Unter den gleichen Einschränkungen leidet auch die Modellierung der Streuung nach *Harvey* [39], welche auf den Ansätzen *Beckmanns*, *Spizzichinos* und der Annahme einer gaußförmigen Profilhöhenverteilung beruht und die Oberfläche als eine phasenmodulierende Übertragungsfunktion (analog zur Transferfunktion einer Optik) systemtheoretisch beschreibt.

Für die Untersuchung und Modellierung der Lichtstreuung an deterministischen Strukturen werden verstärkt rigorose numerische Lösungen gesucht. Vor allem seitens der Halbleiterindustrie [40, 88] besteht ein starkes Interesse an Streulichtmodellen für die Simulation der photolithografischen Prozesse bei der Halbleiterherstellung. Hierfür wurden verschiedene elektromagnetische Simulationsmethoden entwickelt, wie die *Rigorous Coupled Wave Theory* (RCWT) [18], *Time-Domain Finite-Difference* (TDFD) [95], *Integral Equation System Method* (ISEMP) [47] und die *Discrete Dipole Approximation* (DDA) [29].

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß für die Lösung des inversen Streuproblems sowohl für raue Oberflächen als auch für Strukturen kleiner als die Wellenlänge keine allgemein gültigen Ansätze existieren. Es können nur spezifische Lösungen der physikalischen Beschreibung der Streuerverteilung an einer Grenzfläche unter der Annahme entsprechender Randbedingungen gefunden werden. Um dennoch eine Zuordnung zwischen Streulichtverteilung und bestimmten Oberflächeneigenschaften für einen eingegrenzten Anwendungsfall zu ermöglichen, können Mustererkennungsverfahren in Verbindung mit Regressions- und Klassifikationsverfahren zur anwendungsspezifischen Lösung des inversen Streuproblems verwendet werden. In der Literatur sind dafür nur wenige Beispiele zu finden. So benutzt *Rothe* [77] statistische Momente, um die Streulichtverteilung zu charakterisieren und anschließend mit

¹*Davies* setzte außerdem eine gaußförmige Profilhöhenverteilung voraus; später zeigte *Church* [20], daß diese Annahme nicht notwendig ist.

einem statistischen Klassifikator zu klassifizieren. Unter Verwendung der gleichen Merkmale schätzt Baumgart [8] die Oberflächenkenngrößen R_a und R_z mit Hilfe eines auf multivariater Regression beruhenden Modells. Es wird auch versucht, das häufig nichtlineare Verhalten mit quasi-nichtlinearer Regression [12] oder neuronaler Regression [69] zu beschreiben. Basierend auf einem Klassifikationsansatz stellt Jahn [44] Ergebnisse zur streulichtbasierten Defekterkennung auf optischen Oberflächen vor.

2.2 Streulichtmeßgeräte, Streulichtsensoren

Bei der Messung von Streulichtintensitäten unterscheidet man zwischen integraler Streulichtmessung (TIS - *Total Integrated Scattering*) und winkelaufösender Streulichtmessung (ARS - *Angle Resolved Scattering*) [10]. In Abbildung 2.1 ist ein Schnitt durch ein typisches TIS-Meßgerät dargestellt. Als Beleuchtungsquelle wird ein Laser verwendet, dessen Strahldurchmesser und -qualität durch einen Raumfilter im Beleuchtungsstrahlengang bestimmt werden. Bei dem dargestellten TIS-Meßgerät wird das Streulicht über einen sphärischen Sammelspiegel (z.B. eine Coblenz Sphäre) auf einen Detektor fokussiert. Um den Einfluß von Hintergrundstrahlung zu eliminieren, wird häufig ein Chopper in Verbindung mit einem Lock-In Verstärker zur Signalverstärkung eingesetzt. Die einfallende Strahlungsleistung Φ_i und der von der Probe direkt reflektierte Anteil der Strahlungsleistung Φ_r werden über jeweils einen Detektor gemessen. Der TIS-Wert ist nach Gleichung 2.1 als das Verhältnis von

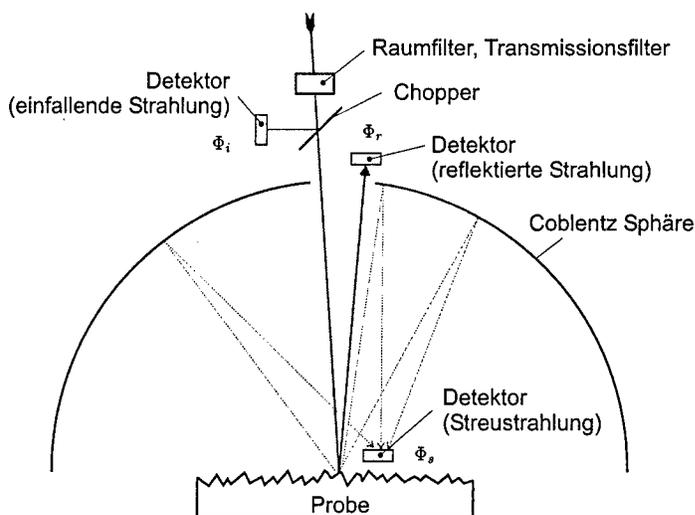


Abbildung 2.1: Aufbau eines klassischen integralen Streulichtmeßgerätes nach [85].

gestreuter Strahlungsleistung Φ_s zur Summe aus direkt reflektierter und gestreuter Strahlungsleistung definiert. Für eine perfekt reflektierende Oberfläche kann $\Phi_r + \Phi_s$ durch die einfallende Strahlungsleistung Φ_i ersetzt werden. Nach der im letzten Abschnitt erwähnten

Streulichtapproximation von *Davies* ist der quadratische Mittenrauheitswert R_q proportional zur Wurzel des TIS-Wertes.

$$TIS = \frac{\Phi_s}{\Phi_r + \Phi_s} \cong \left(\frac{4\pi R_q}{\lambda} \right)^2 \quad (2.1)$$

Dieser Ansatz wird als Rauheitsmeßverfahren in den amerikanischen Standards ASTM E1392 und F1048 [3, 4] geführt. Dabei wird eine Apertur von 5° zur Messung des reflektierten Strahlungsanteils empfohlen.

Basierend auf dem erläuterten Aufbau stellt die Fa. TMA ein kommerziell verfügbares TIS-Meßgerät her. Das Meßgerät erreicht eine Reproduzierbarkeit des TIS-Wertes von 2% bei einer Meßzeit von 5 Sekunden und verwendet einen Laserspot mit einem Durchmesser von 5 mm auf der Probe. Aufgrund der genannten Einschränkungen des Ansatzes von *Davies* lassen sich TIS-Meßsysteme nur bedingt zur Charakterisierung von Oberflächen einsetzen, zumal durch die integrale Messung der Streuung keine Aussage über deren Verteilung gemacht werden kann. Dagegen hat sich die ortsabhängige TIS-Messung in einem eingeschränkten Winkelbereich als eine sehr wirkungsvolle und schnelle Methode zur Charakterisierung von Waferoberflächen bewährt [49]. Ein ähnliches Verfahren wird auch bei der Waferinspektion zur schnellen Detektion von Defekten angewandt. Hierbei wird die Oberfläche mit einem Laserstrahl abgerastert und die von der beleuchteten Stelle resultierende Streustrahlung in einem oder mehreren Winkelbereichen integral gemessen. Das resultierende ortsaufgelöste Streulichtbild wird dann ausgewertet, um sogenannte Lichtpunktdefekte (LPDs - *Light Point Defects*) zu detektieren [80, 88]. Um die für eine on-line Waferinspektion notwendige schnelle Abrasterung der gesamten Waferoberfläche zu erreichen, werden typischerweise Photomultiplier als Detektoren verwendet und der Beleuchtungsfleck wird durch einen schnellen Laserscannern auf der Oberfläche positioniert [92]. Basierend auf diesem Verfahren werden, beispielsweise von den Firmen *KLA-Tencor* und *ADE Optical Systems* Defektscanner für die Halbleiterindustrie angeboten.

Im Gegensatz zur integralen Streulichtmessung werden bei der winkelauflösenden Streulichtmessung die Streulichtintensitäten in mehreren Raumwinkeln gemessen. Die winkelauflösende Messung der Streulichtverteilung stellt gegenüber der integralen Messung einen Informationsgewinn dar, der eine genauere Charakterisierung der streuenden Struktur zuläßt. Der klassische Aufbau eines typischerweise für die winkelauflösende Streulichtmessung verwendeten Streulichtgoniometers ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Analog zum TIS-Meßprinzip, besteht die Beleuchtungseinrichtung aus einem Laser, Raumfilter und Chopper. Zusätzlich kann ein Polarisator in den Strahlengang gebracht werden, so daß der Polarisationszustand der einfallenden Strahlung eingestellt werden kann. Die Messung der Streulichtintensität in einem bestimmten Raumwinkel erfolgt durch einen auf der Hemisphäre über der Probe beweglichen Detektor. Um bei der Detektion nur bestimmte Polarisationsrichtungen zuzulassen, kann der Detektor zusätzlich mit einem Polarisator ausgerüstet werden [36]. Somit ist es möglich, nicht nur die Intensität, sondern auch die Polarisation der gestreuten Strahlung winkelabhängig zu messen. Durch den Einsatz eines Choppers kann die Hintergrundstrahlung unterdrückt und das Signal zu Rausch Verhältnis des Streulichtgoniometers erhöht werden. Als Beispiel für ein solches Goniometer soll an dieser Stelle das *Goniometric Optical Scatter Instrument* (GOSI) des NIST² erwähnt werden. Dieses System ist in der Lage,

²GOSI wurde von der Laser Applications Group der Optical Technology Division des National Institute of Standards and Technology (USA) entwickelt.

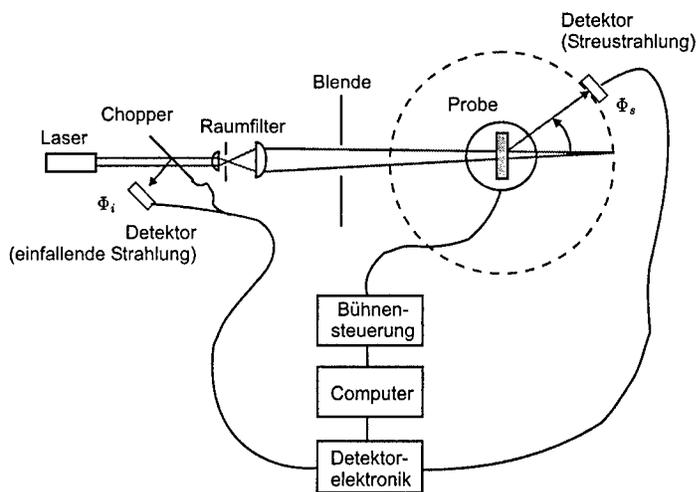


Abbildung 2.2: Aufbau eines klassischen winkelauflösenden Streulichtmeßgerätes nach [85].

Streustrahlungsleistungen über einen Dynamikbereich von 14 Dekaden zu messen. Es konnte gezeigt werden, daß die untere Detektionsgrenze des Systems durch die *Rayleigh*-Streuung an den Luftmolekülen innerhalb des Beleuchtungsflecks bestimmt wird [1, 37]. Die Positioniergenauigkeit des Detektors beträgt 0.1° und der Abstand zwischen Probe und Detektor beträgt 0.6 m.

Zur Beurteilung der Qualität von optischen Bauelementen wurde in Deutschland das Scatterometer *STREUIX* [90] entwickelt. Ein ähnlicher Aufbau [62] wurde auch am Fraunhofer Institut für angewandte Optik (IOF) realisiert.

Eine etwas modifizierte Variante der ARS-Messung stellt das $2-\Theta$ Prinzip dar [13]. Bei diesem Meßprinzip wird die Intensität der nullten Beugungsordnung in Abhängigkeit vom Einfallswinkel der einfallenden Strahlung gemessen, d.h. die Winkelposition des Detektors entspricht immer dem zum Einfallswinkel korrespondierenden Ausfallswinkel. Diese Art der Diffraktionsanalyse wird im allgemeinen dann angewandt, wenn höhere Beugungsordnungen nicht ausbreitungsfähig sind und nur die nullte Beugungsordnung zur Verfügung steht. Häufig wird das $2-\Theta$ Prinzip in der Halbleiterindustrie für die Untersuchung von deterministischen Strukturen verwendet [96].

Der vorgestellte klassische Streulichtgoniometeraufbau eignet sich aufgrund seiner langen Meßzeiten und seines aufwendigen Aufbaus, aus in den Abmessungen großen bewegten Teilen, nicht für eine schnelle in-situ Charakterisierung von Oberflächen. Die Meßzeit, die ein klassisches Goniometer benötigt, um die Streuverteilung eines einzigen beleuchteten Ausschnittes der Probenoberfläche aufzunehmen, beträgt mehrere Minuten, bei einigen Geräten sogar Stunden. Während derartige Goniometer einen einzigen Detektor auf der Hemisphäre verfahren, erspart eine Anordnung mehrerer gleichzeitig messender Detektoren die aufwendige Mechanik und vor allem die lange Meßzeit. Von Marx wird in [54] das System *DALLAS*

vorgestellt, welches aus einer halbkreisförmigen Anordnung von 87 Einzeldetektoren mit einem Winkelabstand von 2° besteht. Nachteilig bei dieser Anordnung sind die großen Abstände zwischen den einzelnen Photodioden und die Beschränkung auf einen Azimutwinkel. Durch den Einsatz von Mehrdetektoranordnungen (Photodiodenmatrizen, CCDs) kann der Aufwand zur Erfassung der Lichtintensitäten stark reduziert werden, und es wird eine parallele Messung ermöglicht.

Bei integrierten Mehrdetektoranordnungen, wie CCDs, muß in der Regel von planaren photosensitiven Strukturen ausgegangen werden. Demzufolge ist für eine Erfassung der Streulichtverteilung auf der Hemisphäre eine Übertragung der Streulichtintensitäten von der Hemisphäre auf die ebene Detektoranordnung notwendig. Prinzipiell gibt es zwei Varianten zur Realisierung einer solchen Wandlung: zum einen mit Hilfe von klassischen optischen Bauelementen (Hohlspiegeln, Linsensystemen, Streukugeln, Streuscheiben) und zum anderen mit Hilfe von Lichtwellenleitern (LWL). Von der Fa. BRO Inc. wurde ein Streulichtscatterometer [17] basierend auf einem speziell gezogenen und geschliffenen Glasfaserbündel entwickelt. Mit dem Glasfaserbündel konnte eine Abdeckung der Hemisphäre von 45° in Richtung der Polarwinkel und 360° in Richtung der Azimutwinkel mit einer Winkelaufösung von 0.1° erreicht werden. In einem Patent von *Poszner, et.al.* [81] werden die Lichtwellenleiter durch einen feldgestützten Ionenaustausch in einem Glassubstrat realisiert und direkt an eine CCD-Zeile gekoppelt. Bei der technischen Realisierung mußte allerdings die Wellenleiteranordnung eines Azimutwinkels für einen Polarwinkelbereich von $0 \dots 90^\circ$ in drei Einzelsegmente unterteilt werden. Problematisch bei der technischen Umsetzung ist außerdem die Herstellung von Masken für die Lichtwellenleitereingänge, welche notwendig sind, um das Einkoppeln von Streulicht in das Substrat außerhalb der Lichtwellenleitereingänge zu verhindern. In der vorliegenden Arbeit wird eine Glasfaseranordnung zur Transformation der sphärischen Streulichtmeßstellen in eine ebene Anordnung nach einem Patent von *Rothe und Riedel* [76] verwendet. Diese Anordnung hat den Vorteil, daß sich nahezu beliebige Anordnungen von Streulichtmeßstellen auf der Hemisphäre realisieren lassen und außerdem kein Streulicht zwischen den Lichtwellenleitern einkoppeln kann.

In Abbildung 2.3 ist eine Übersicht über unterschiedliche Realisierungsmöglichkeiten von Vorsatzoptiken dargestellt. Ein planarer Sensor ohne Vorsatzoptik wird von *Hirleman* zur Untersuchung von Streuquerschnitten auf strukturierten Waferoberflächen verwendet [83]. Der kreisförmige *Ring-Wedge* Sensor ist zweigeteilt und besteht in der oberen Hälfte aus einzelnen halbkreisförmigen Photodioden und in der unteren Detektorhälfte aus streifenförmigen Photodioden.

Zusammenfassend ist in Bezug auf die Anwendung von Vorsatzoptiken festzustellen, daß alle Arten von Vorsatzoptiken zusätzliche Streuerscheinungen im Meßsystem erzeugen und damit zusätzliche Meßfehler hervorrufen. Besonders stark ist dieses bei zusammengesetzten diffraktiven Bauelementen zu beobachten. Daher wurde in der vorliegenden Arbeit neben einem faseroptischen Streulichtsensor auch ein Sensor ohne Vorsatzoptik untersucht. Auf die entsprechenden Anordnungen wird in Kapitel 5 eingegangen.

Für die Streulichtsensorik im Lichtwellenlängenbereich von $0.3 \mu\text{m}$ bis $1.1 \mu\text{m}$ lassen sich Siliziumdetektoren basierend auf MOS-Technologien wie *Charge Coupled Devices* (CCDs) oder *Charge Injected Devices* (CIDs) verwenden. Darüber hinaus hat in den letzten Jahren die Fertigung von Photodetektoren basierend auf der CMOS Fertigungstechnologie einen starken Aufschwung erfahren. Diese Technologie hat den Vorteil, daß man Photodetektoren zu-

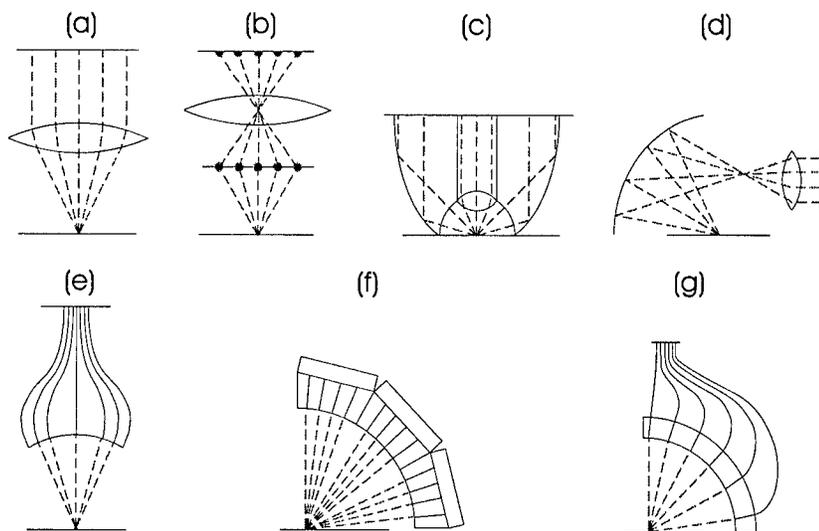


Abbildung 2.3: Realisierungsmöglichkeiten von Vorsatzoptiken für ARS-Streulichtsensoren: (a) Linsensystem, (b) Abbildung der Streuung an einer Streuscheibe bzw. Streukugel, (c) zusammengesetztes optisches System [48], (d) Spiegeloptik [58], (e) speziell gezogenes Faserbündel [17], (f) integriert optische Wellenleiter [81], (g) faseroptische Wellenleiter [76].

sammen mit Logikbaugruppen und Analogbaugruppen auf einem Chip integrieren kann und somit die Möglichkeit der Herstellung intelligenter Photodetektoren hat [60]. Mit der Entwicklung von *Focal Plane Arrays* (FPAs) stehen nun auch bildgebende Detektoren für infrarote Strahlung in den Wellenlängenbereichen $3\text{-}5\ \mu\text{m}$ und $8\text{-}12\ \mu\text{m}$ zur Verfügung. So wurde beispielsweise von der Fa. Boeing und der Fa. Surface Optics ein Infrarot-Streulichtmeßgerät basierend auf einem Microbolometerarray entwickelt [58].

2.3 Standards

Für die Definition von Profilparametern und Rauheitskenngrößen stehen im wesentlichen die aktuellen Deutschen Industrie-Normen DIN 4761 und DIN 4762 [28] bzw. die internationale Industrienorm ISO 4287 zur Verfügung. Speziell für die Auswertung von Messungen mit Tastschnittgeräten geben die DIN 4772 und DIN 4776 Hinweise für die Berechnung der Rauheitskenngrößen. In der amerikanischen Norm ASTM E1209 [5] werden ebenfalls verschiedene Rauheitskenngrößen definiert und Verfahren zur Trennung von Rauheit und langwelligem Profilanteilen (sog. Detrending) aufgezeigt. In Kapitel 4.1 werden die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Oberflächenkenngrößen basierend auf den genannten Industrienormen vorgestellt. Im Bereich der Standardisierung von Oberflächendefekten konnten nur Standards für die Klassifikation von Defekten an optischen Bauelementen (BS 4301, DIN 3140, MIL-O-13830A) und im Bereich der Halbleiterindustrie gefunden werden.

In Bezug auf die Streulichtmeßtechnik sind die amerikanischen Standards ASTM F1048 [3] und ASTM E1392 [4] zu nennen. Die Norm ASTM F1048 widmet sich der Messung der Oberflächenrauheit von optischen Bauelementen mit Hilfe des Streulichtintegrals (TIS). Der ASTM E1392 Standard definiert die geometrischen Kenngrößen für die winkelauflösende Streulichtmessung, die Streulichtverteilungsfunktion BRDF und gibt Hinweise zur Kalibrierung von Streulichtgoniometern. Als Grundlage für die in Kapitel 4.2 eingeführten radiometrischen Größen und Formelzeichen dient die Deutsche Industrie-Norm DIN 5031 [26].

Kapitel 3

Zielsetzung der Arbeit

Wertet man den Stand der Technik in Bezug auf die Anwendung des Streulichtverfahrens für die Oberflächenprüfung aus, zeigt sich ein Mangel an universell einsetzbarer, winkelauflösender Streulichtsensorik mit den Eigenschaften: kompakter, modularer und kostengünstiger Aufbau, hoher radiometrischer Dynamikbereich bei gleichzeitig hoher Winkelauflösung und geringer Meßzeit. Eine solche Sensorik ist notwendig um anwendungsspezifische on-line Untersuchungen durchführen zu können und stellt außerdem den Ausgangspunkt für eine anwendungsbezogene Entwicklung von Streulichtsensoren für die Oberflächenprüfung dar. In der Literatur sind zudem nur wenige experimentell verifizierte Ansätze zum Einsatz von Mustererkennungsverfahren in der Auswertung von Streulichtmessungen zu finden. Ziel der vorliegenden Arbeit ist es daher, einen Beitrag auf eben diesen Gebieten zu leisten.

Dementsprechend liegt ein Schwerpunkt der Arbeit in der Realisierung geeigneter Sensorik, deren metrologischer Charakterisierung und im experimentellen Nachweis der Leistungsfähigkeit der Sensoren. Im Rahmen der Arbeit werden zwei verschiedene Konzepte der Realisierung von Streulichtsensoren untersucht. Es wird sowohl ein faseroptischer Streulichtsensor nach einem Patent von *Rothe* und *Riedel* [76] weiterentwickelt, als auch ein neuartiger planarer Streulichtsensor konzipiert und realisiert. Notwendige Voraussetzung für eine radiometrische Charakterisierung der beiden Streulichtsensoren ist die Erarbeitung von Sensormodellen und Korrekturverfahren, die eine absolute Messung der Streulichtverteilung erlauben. Der experimentelle Nachweis der radiometrischen Meßfehler wird anhand von Messungen an Streulichtstandards geführt.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Durchführung experimenteller Untersuchungen an Oberflächen und Oberflächendefekten und in der Anwendung verschiedener Auswertungsverfahren. Es werden sowohl bekannte physikalisch-modellbasierte Theorien (s. Kap. 2.1 und Kap. 4.3) zur Lösung des inversen Streuproblems angewendet, als auch Ansätze zur mustererkennungsbasierten Auswertung von Streulichtmessungen untersucht. Um einen Vergleich mit profilometrischen Meßverfahren zu ermöglichen, wird ein Versuchsaufbau realisiert, der ein Rasterkraftmikroskop (AFM - *Atomic Force Microscope*) und die beiden Streulichtsensoren mit einer gemeinsamen Probenzuführung kombiniert. Vergleichsmessungen zwischen AFM und Streulicht an glatten Oberflächen sollen Aufschluß über die Eignung von Streulichtsensoren zur Prüfung von Oberflächenkenngrößen geben. Die Nachweisempfindlichkeit der Streulichtsensoren in Bezug auf Oberflächendefekte wird anhand von Streulichtmessungen an kleinsten Partikeln experimentell untersucht. Eine Bewertung

der im Rahmen der Arbeit zusammengestellten Streulichtverteilungsmerkmale schließt den experimentellen Teil der Arbeit ab.

Im theoretischen Teil der Arbeit sind die notwendigen Grundlagen zur Ermittlung von Oberflächenkenngrößen, die Definition der radiometrischen Kenngrößen und die Auswertungsverfahren beschrieben.

Kapitel 4

Theoretische Grundlagen

In den folgenden Abschnitten werden die theoretischen Grundlagen für die in der Arbeit angewandten Verfahren zur Oberflächencharakterisierung und zur Streulichtmessung erörtert. Im wesentlichen unterteilt sich diese Thematik in die Schwerpunkte Oberflächenkenngößen, radiometrisches Erfassen der Lichtstreuung und Streulichtanalyseverfahren.

Um einen Vergleich zwischen streulichtbasierter Oberflächencharakterisierung und profilometrischer Oberflächenvermessung zu ermöglichen, werden charakteristische Kenngößen der Oberflächentopographie benötigt. Die hierfür im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten Oberflächenkenngößen und ihre Berechnung werden im nächsten Abschnitt erläutert.

Die für eine Beschreibung der Streulichtverteilung notwendigen radiometrischen Größen werden im Abschnitt 4.2 definiert. Basierend auf der Streulichtverteilungsfunktion und den erläuterten Oberflächenkenngößen werden Streulichtverfahren vorgestellt, die einen Rückschluß von der Streulichtverteilung auf Oberflächeneigenschaften ermöglichen. In diesem Zusammenhang wird sowohl auf modellbasierte Streulichtapproximationen als auch auf Mustererkennungsverfahren eingegangen.

4.1 Beschreibung von Oberflächentopographien durch Kenngößen

Durch die Abtastung einer Oberfläche mit einem Profilmeßgerät wird ein diskretes Abbild der Oberflächentopographie erzeugt. Das Profil kann entlang einer Strecke (eindimensionaler Profilschnitt) oder über eine Fläche abgetastet werden (zweidimensionale Profilhöhenmatrix). Die im folgenden betrachteten Kenngroßendefinitionen der Oberflächentopographie beziehen sich auf diskrete Profilverläufe mit äquidistanter lateraler Abstützung. Die Definition der Kenngößen erfolgt in Anlehnung an die Standards DIN 4762 und ASTM E1209. Da die Streulichtmessung einer flächenhaften Betrachtung der Oberflächentopographie entspricht, werden die eindimensionalen Kenngößen der DIN 4762 auf zweidimensionale Kenngößen erweitert. Umfangreiche Diskussionen zum Thema Oberflächencharakterisierung sind in [91, 94] zu finden und eine einheitliche Terminologie, Formelapparat und meßtechnische Standardisierungen können den Standards ANSI B46.1, DIN 4761, DIN 4762 und ASTM E1209 [5, 6, 27, 28] entnommen werden.

Für die Berechnung der Kenngrößen werden die Profilhöhen auf eine Profilmittellinie bezogen, so daß die Profilhöhen als Profilabweichungen von einem *Nominal Profil*¹ betrachtet werden können. Folglich müssen vor der Berechnung von Oberflächenkenngrößen bestimmte Profilanteile, die sowohl von der Probe stammen können als auch durch systematische Fehler des Meßgerätes entstanden sein können, von dem gemessenen Profil entfernt werden. Dieser Schritt wird nachfolgend als *Detrending* bezeichnet und ist von entscheidender Bedeutung für die Kenngrößenmittlung. Als Detrendingverfahren werden in ASTM E1209 Mittelwertkorrektur, Geradenausgleich und ein Polynom zweiten Grades als Funktionen für eine eindimensionale Profilanpassung vorgeschlagen. Für Profilanteile, welche sich nicht durch einfache Funktionen beschreiben lassen, wurden von Rothe [70,71] Detrendingverfahren entwickelt, welche in der Lage sind, stochastische Profilanteile von systematischen Anteilen zu trennen.

Das **Profil** sei für den eindimensionalen Profilschnitt durch $z_n(x_n)$ und für eine zweidimensionale Profilhöhenmatrix durch $z_{n,m}(x_n, y_m)$ symbolisiert. Geht man ferner von einer äquidistanten Abstützung aus, ist die laterale Ortsauflösung konstant und kann durch $D_x = x_{n+1} - x_n$ und $D_y = y_{m+1} - y_m$ beschrieben werden.

Mit der Anwendung eines Detrendingverfahrens erhält man aus dem gemessenen Höhenprofil das **detrendete Profil** z' . Für die nachfolgend definierten Kenngrößen wird ein mittelwertfreies detrendetes Profil ($z' = 0$) vorausgesetzt.

Ein Beispiel für die Anwendung verschiedener Detrendingverfahren auf eine Rasterkraftmikroskopmessung einer polierten Stahlprobe ist in Abbildung 4.1 dargestellt. In der unbearbeiteten Höhenmatrix ist deutlich ein langwelliger Profilanteil infolge einer Wölbung der Probenoberfläche zu erkennen. Außerdem ist die Höhenmatrix mit einem sprungförmigen Gerätefehler belegt. Die detrendeten Oberflächenprofile z' zeigen deutliche Unterschiede bezüglich der darin enthaltenen Topographieanteile. Entsprechend führt die Berechnung der quadratischen Mittenrauheit R_q in Abhängigkeit vom verwendeten Detrendingverfahren zu unterschiedlichen Ergebnissen. Dieses Beispiel demonstriert die starke Abhängigkeit der Oberflächenkenngrößen von den bandbegrenzenden Detrendingverfahren. Folglich ist für einen Vergleich von Oberflächenkenngrößen verschiedener Proben die Beachtung der zugrundeliegenden Detrendingverfahren zwingend notwendig. Analog gilt es, für den Vergleich der Meßergebnisse verschiedener Oberflächenmeßverfahren deren Bandbegrenzung beim Vergleich von Oberflächenkenngrößen zu beachten.

Der bereits erwähnte **quadratische Mittenrauheitswert** R_q ist definiert als der quadratische Mittelwert der Profilabweichungen innerhalb einer Auswertelänge L . Die Rauheit R_q ergibt sich durch

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N z_n'^2} \quad \text{und} \quad R_{q2} = \sqrt{\frac{1}{N \cdot M} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M z_{n,m}'^2} \quad (4.1)$$

wobei N die Anzahl der abgetasteten Profilhöhenwerte entlang eines Profilschnittes und M die Anzahl der Profilhöhenwerte in der dazu senkrechten Richtung sind.

Die **quadratische mittlere Profilneigung** P_q ist nach DIN4762² definiert als der qua-

¹Die Bezeichnung „Nominal Profil“ wird in ANSI B46.1 verwendet.

²Das in DIN4762 verwendete Symbol Δq für die Profilneigung soll, um Verwechslungen zu vermeiden, nicht verwendet werden.

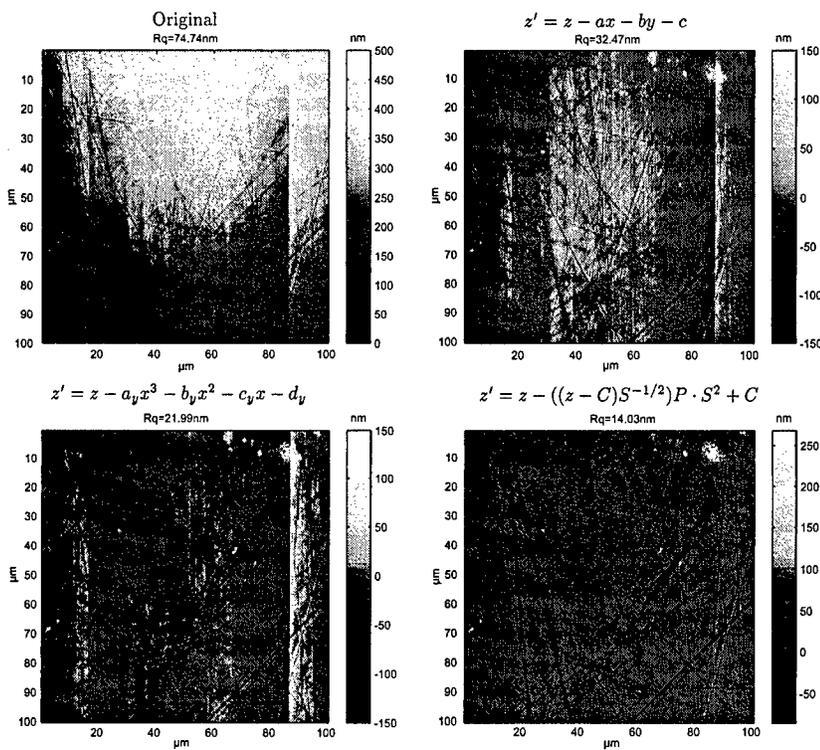


Abbildung 4.1: Gegenüberstellung verschiedener Detrendingverfahren: o.l. Original, o.r. mit LS-Ebene detrendet, u.l. nach ASTM1209 zeilenweise mit LS-Parabel detrendet, u.r. detrendet mit erstem Eigenvektor der Hauptkomponentenanalyse.

drastische Mittelwert der Differentialquotienten der Profildordinaten innerhalb einer Bezugsstrecke. Für ein diskretes Profil mit äquidistanter lateraler Auflösung lässt sich P_q näherungsweise mit Gleichung 4.2 berechnen.

$$P_q \approx \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\frac{\Delta z'_n}{\Delta x_n} \right)^2} \quad \frac{\Delta z'_n}{\Delta x_n} \approx \frac{z'_{n+1} - z'_n}{D_x} \quad (4.2)$$

Für den zweidimensionalen Fall ist die Profilneigung nach DIN4762 nicht definiert. Eine Möglichkeit der Definition einer Profilneigung für eine zweidimensionale Profilhöhenmatrix kann unter Verwendung der eindimensionalen Definition der Profilneigung entlang der beiden Koordinatenachsen x und y erfolgen. Die resultierenden Profilneigungen P_{qx} und P_{qy} stellen somit die mittleren quadratischen Ableitungen in x bzw. y Richtung dar und können zu einem mittleren quadratischen Gradienten P_{qz} der Oberflächentopographie zusammengefasst werden.

Eine weitere Profilkenngröße ist die **mittlere quadratische Profilkrümmung** K_q . Diese Kenngröße ist weder ein- noch zweidimensional in der DIN4762 definiert, stellt aber ein zur Charakterisierung von Oberflächen durchaus geeignetes Merkmal dar. Für einen eindimensionalen Profilschnitt z' kann die mittlere quadratische Profilkrümmung K_q näherungsweise mit

$$K_q \approx \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\frac{\Delta^2 z'_n}{\Delta x_n^2} \right)^2} \quad \frac{\Delta^2 z'_n}{\Delta x_n^2} \approx \frac{2 \cdot z'_n - z'_{n+1} - z'_{n-1}}{2 \cdot D_x} \quad (4.3)$$

berechnet werden. Die Berechnung der Profilkrümmung für eine zweidimensionale Höhenmatrix läßt sich analog zur Profilineigung in eine Berechnung der mittleren quadratischen Profilkrümmung in x und y Richtung zerlegen. Entsprechend stellen die resultierenden Profilkümmungen K_{qx} und K_{qy} die mittlere Profilkümmung in x bzw. y Richtung dar. Die Quadratsumme der Profilkümmungen K_{qx} und K_{qy} entspricht der Quadratsumme der lokalen Anwendung des diskreten Laplaceoperators Δ_L , wie er beispielsweise aus der Bildverarbeitung [89] bekannt ist.

$$K_{q2}^2 = K_{qx}^2 + K_{qy}^2 = \frac{1}{N \cdot M} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M (\Delta_L z'_{n,m}(x_n, y_m))^2 \quad (4.4)$$

In Gl. 4.2 und Gl. 4.3 sind zwei mögliche Approximationen des diskreten Profilanstieges bzw. der diskreten Profilkümmung angegeben. Für weiterführende Diskussionen über die Berechnung der diskreten Approximation des Profilgradienten oder der Profilkümmung sei an dieser Stelle auf die Literatur der Bildverarbeitung [46, 53] verwiesen, die sich ausführlich mit dieser Thematik auseinandersetzt.

Eine Funktion, welche die Selbstähnlichkeit eines Oberflächenprofils beschreibt, ist die **Autokorrelationsfunktion (AKF)**. Die AKF beschreibt den mittleren linearen statistischen Zusammenhang eines Profils $z(x)$ zu den um τ verschobenen Profil $z(x + \tau)$ [93]. Für ein diskretes eindimensionales periodisches Profil wird die Autokorrelationsfunktion R_1 durch

$$R_1(\tau_k) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N z'_n \cdot z'_{n+k} \quad \tau_k = k \cdot D_x \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (4.5)$$

berechnet. Handelt es sich bei dem zu betrachtenden Oberflächenprofil um ein nichtperiodisches stochastisches Höhenprofil, erfolgt die Berechnung der AKF ohne eine periodische Fortsetzung des Profils an den Rändern. Demzufolge ergibt sich die Rechenvorschrift mit

$$R_1(\tau_k) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-k} z'_n \cdot z'_{n+k} \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.6)$$

Aus der Rechenvorschrift ist zu erkennen, daß für eine feste Auswertelänge N und zunehmender Korrelationstiefe τ_k die Anzahl der Produkte abnimmt. Folglich nimmt die Signifikanz der AKF für diese Art der Berechnung mit steigender Korrelationstiefe ab [93]. Die Autokorrelationsfunktion ist eine gerade Funktion und ihr Anfangswert $R_1(0)$ ist gleich dem quadratischen Mittenraueheitswert R_q . Ein häufig in der Praxis verwendetes Merkmal der Autokorrelationsfunktion für nichtperiodische stochastische Signale ist die **Korrelationslänge** τ_c . Diese wird durch den Abfall von R_1 auf einen bestimmten Wert gekennzeichnet. Typischerweise wird hierfür der Punkt des Abfalls der AKF auf

$$R_1(\tau_c) = R_1(0) \frac{1}{e} \quad (4.7)$$

verwendet. In [5, 85] sind weiterführende Diskussionen zur Berechnung der diskreten Autokorrelationsfunktion von Meßreihen zu finden.

Eine Darstellung der spektralen Anteile eines Oberflächenprofils ist mit Hilfe der **spektralen Leistungsdichtefunktion** (*PSD - power spectral density*) der Oberfläche möglich. Die PSD S stellt die Verteilung der quadratischen Mittenrauheit über die im Profil enthaltenen harmonischen Ortsfrequenzen dar und ist definiert als das Betragsquadrat der Fouriertransformierten des Oberflächenprofils.

$$S(f) = |\mathcal{F}(z')|^2 = \mathcal{F}(z') \cdot \mathcal{F}(z')^* \quad (4.8)$$

Für die Berechnung der PSD eines eindimensionalen Profilschnittes oder einer zweidimensionalen Profilhöhenmatrix (d.h. die Werte liegen nur an diskreten Gitterpunkten vor) wird die diskrete Fouriertransformation (DFT) verwendet. Folglich ergibt sich die PSD S_1 eines eindimensionalen Profilschnittes mit³

$$S_1(f_k) = \frac{2}{N} \left| \sum_{n=1}^N e^{-i2\pi \frac{(n-1)k}{N}} W_n z'_n \right|^2 \quad f_k = \frac{k}{N \cdot D_x} \quad k = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad (4.9)$$

wobei f_k die Ortsfrequenz ist, und W_n eine zusätzliche Fensterfunktion darstellt. Da die DFT von einem periodisch fortgesetzten Signal ausgeht, ist zur Vermeidung von Artefakten, besonders für die Analyse von Signalen mit unvollständigen periodischen Anteilen, eine Dämpfung der Signalländer im Ortsbereich notwendig. Eine solche ortsabhängige Dämpfung kann durch die Multiplikation mit einer Fensterfunktion W_n erreicht werden [93]. Die PSD ist eine gerade und reelle Funktion, deren Werte größer oder gleich Null sind. Diese Eigenschaft wird in Gl. 4.9 ausgenutzt, indem die PSD nur über die positiven Frequenzen berechnet wird und die Funktionswerte mit Zwei multipliziert werden. Stellt man die Frequenzen f_k als Ortsfrequenzen dar, ergibt sich für S_1 ein Ortsfrequenzbereich von

$$\frac{1}{N \cdot D_x} \leq f_k \leq \frac{1}{2 \cdot D_x}, \quad (4.10)$$

wobei $2 \cdot D_x$ auch als *Nyquist* Wellenlänge bezeichnet wird. Bei dem angegebenen Ortsfrequenzbereich wurde der Gleichanteil $S_1(0)$ weggelassen, da dieser ohnehin für ein mittelwertfreies Profil Null ist. Nach der *Parsevalschen* Beziehung gilt außerdem, daß das Integral über das quadrierte Signal gleich dem Integral über die PSD ist. Angewendet auf die statistische Profilkenngröße R_q besteht daher folgende Beziehung zwischen R_q und der PSD eines eindimensionalen Profilschnittes.

$$\overline{z'^2} = R_q^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} S_1(f_k) \quad (4.11)$$

Auch für die Profilkenngrößen P_q und K_q , lassen sich mit Hilfe der **spektralen Momente** Zusammenhänge zur PSD formulieren. Die spektralen Momente einer eindimensionalen PSD S_1 sind definiert als

$$m_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} S_1(f_k) (2\pi(k-1)/N)^i. \quad (4.12)$$

³In der Oberflächenmeßtechnik wird die PSD häufig noch mit D_x bzw. D_y multipliziert, so daß die eindimensionale PSD S_1 die Einheit *Länge*³ und die zweidimensionale S_2 die Einheit *Länge*⁴ hat.

Da die PSD eine gerade Funktion ist, sind nur die geraden spektralen Momente ungleich Null, außerdem braucht die Berechnung der Momente nur für die positiven Frequenzen durchgeführt zu werden. Basierend auf den spektralen Momenten lassen sich folgende Zusammenhänge zwischen der PSD und den Profilkenngrößen R_q , P_q und K_q formulieren [5].

$$R_q = \sqrt{m_0} \quad P_q = \sqrt{\frac{m_2}{2}} \quad K_q = \sqrt{\frac{3 \cdot m_4}{8}} \quad (4.13)$$

Aus der Tatsache, daß sich aus der PSD statistische Kenngrößen der Oberfläche berechnen lassen, folgt, daß auch bei Verlust der Phaseninformation des Profils diese Kenngrößen meßtechnisch erfaßbar sein können. Dieser Zusammenhang wird bei verschiedenen Streulichtapproximationen ausgenutzt, um eine Beziehung zwischen Streulichtverteilung und statistischen Oberflächenkenngrößen herzustellen. Da durch die Bildung des Betragsquadrates einer komplexen Größe die Phaseninformation verloren geht, kann durch eine Rücktransformation nicht eindeutig auf das Oberflächenprofil geschlossen werden, die Rücktransformation führt statt dessen auf die Autokorrelationsfunktion. Die Autokorrelationsfunktion und die PSD bilden ein Fouriertransformationspaar.⁴

$$R(\tau) = \mathcal{F}^{-1}\{S(f)\} \quad (4.14)$$

Für die Berechnung der Fouriertransformation kann an dieser Stelle ebenfalls die Eigenschaft der PSD, daß sie eine gerade und reelle Funktion ist, ausgenutzt werden. Für eine gerade und reelle Funktion fällt der Imaginärteil der Fouriertransformation weg und die Fouriertransformation läßt sich auf den \cos -Term vereinfachen. Demzufolge läßt sich die Berechnung der eindimensionalen AKF aus der eindimensionalen PSD mit der diskreten Kosinustransformation realisieren. Betrachtet man nur die positiven Frequenzen der PSD, ergibt sich folgende Rechenvorschrift für die Berechnung der AKF.

$$R_1(\tau_k) = \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} S_1(f_k) \cos(2\pi nk/N) \quad k = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} \quad (4.15)$$

Zur graphischen Veranschaulichung der genannten Kenngrößen sind in Abbildung 4.2 verschiedene Oberflächenkenngrößen am Beispiel einer polierten Stahloberfläche dargestellt. Dabei verdeutlicht die PSD den anisotropen Charakter der aufgenommenen Oberflächentopographie z. Zudem ist in der AKF eine leichte Periodizität infolge der ausgeprägten Kratzerstrukturen (zwei starke fast parallele Kratzer in horizontaler Richtung) zu erkennen.

⁴Damit die diskrete AKF eines Datensatzes und die diskrete Fouriertransformation der PSD des gleichen Datensatzes übereinstimmen, muß die Fensterfunktion $W_n = 1$ für die Fouriertransformation verwendet werden. Da bei der Berechnung der PSD das Profil periodisch fortgesetzt wird, erhält man die gleiche AKF aus dem Profil, wenn man die periodisch fortgesetzte Berechnung der AKF nach Gl. 4.5 anwendet.

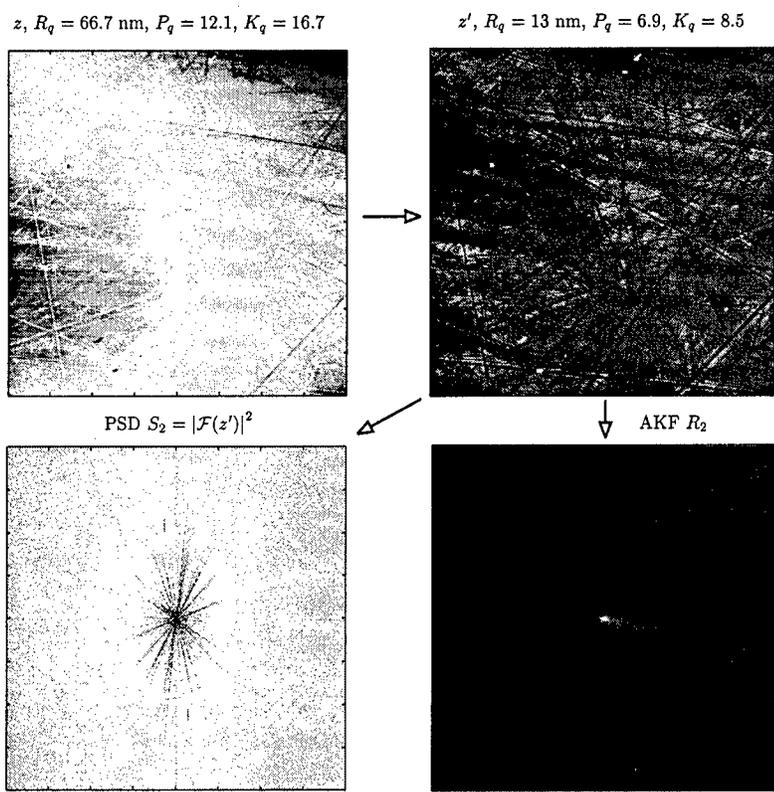


Abbildung 4.2: Darstellung der detrendeten Oberfläche z' einer polierten Stahloberfläche (AFM-Messung) z , der zugehörigen PSD S_2 und AKF R_2 .

4.2 Radiometrisches Erfassen der Lichtstreuung

Mit Hilfe von radiometrischen Größen kann die Ausbreitung und Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung beschrieben werden. Die nachfolgend erläuterten radiometrischen Größen folgen in ihren Bezeichnungen der DIN 5031⁵ [26]. Im Gegensatz zu den ebenfalls in der DIN 5031 definierten fotometrischen bzw. lichttechnischen Größen werden die radiometrischen Größen nicht an die wellenlängenabhängige Empfindlichkeit des menschlichen Auges angepasst. Die Definition der nachfolgend beschriebenen Streulichtverteilungsfunktion (BRDF) stützt sich auf die von *Nicodemus* vom US National Bureau of Standards 1977 vorgeschlagene Nomenklatur.

Die von einem Objekt ausgehende elektromagnetische Strahlung ist meßbar als **Strahlungsleistung** bzw. **Strahlungsfluß** Φ . Sie beschreibt damit die Photonenergie bzw. **Strahlungsenergie** Q pro Zeit und wird mit der Dimension der Leistung [W] angegeben.

$$\Phi \equiv \frac{\partial Q}{\partial t} \quad [W] \quad (4.16)$$

Die **Bestrahlungsstärke** E ist definiert als die auf eine Fläche einfallende Strahlungsleistung.

$$E \equiv \frac{\partial \Phi}{\partial A} \quad [W/m^2] \quad (4.17)$$

Bezieht man die Strahlungsleistung Φ dagegen auf den durchstrahlten Raumwinkel, erhält man die **Strahlstärke** I .

$$I \equiv \frac{\partial \Phi}{\partial \Omega} \quad [W \cdot sr^{-1}] \quad (4.18)$$

Durch die Normierung der Strahlstärke mit der projizierten Flächeneinheit erhält man die **Strahllichte** L .

$$L \equiv \frac{\partial I}{\partial A \cdot \cos \theta} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial A \cdot \cos \theta \cdot \partial \Omega} \quad \left[\frac{W}{m^2 \cdot sr} \right] \quad (4.19)$$

Der **Raumwinkel** Ω ist (in der Stereometrie analog zum Radiant in der Planimetrie) als Quotient aus der abgegrenzten Kugelfläche A_k und dem quadratischen Radius des Kugelraums definiert.

$$\Omega \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi \equiv \frac{A_k}{r^2} \Omega_0 \quad \Omega_0 = 1 \text{ sr} \quad [sr] \quad (4.20)$$

Bei kleinen Raumwinkeln kann für eine einfachere Berechnung die Kugelfläche näherungsweise mit einer ebenen Kreisfläche angesetzt werden. Der Ausdruck $\cos \theta \cdot d\Omega$ wird häufig auch als projizierter differentieller Raumwinkel Ω' bezeichnet.

⁵Der in der DIN 5031 verwendete Index „e“ (energetisch) für die radiometrischen Größen wird hier weggelassen, da eine Verwechslung mit fotometrischen Größen ausgeschlossen ist.

Eine Möglichkeit zur winkelabhängigen radiometrischen Beschreibung der Streulichtverteilung über einer beleuchteten Oberfläche stellt die **Bidirektionale Reflexions-Verteilungsfunktion (BRDF)** dar. Sie wurde von *F. A. Nicodemus* [63] 1977 zur Definition und Messung der winkelabhängigen Reflexion von Optiken eingeführt. Die BRDF ist definiert als der Quotient aus differentieller, von der Oberfläche rückgestreuter, Strahlendichte ∂L_s und differentieller, auf die Oberfläche einfallender, Bestrahlungsstärke ∂E_i [4].

$$BRDF(\theta_i, \Phi_i, \theta_s, \Phi_s) \equiv \frac{\partial L_s}{\partial E_i} \equiv \frac{\frac{\partial^2 \Phi_s}{\partial A \cdot \cos \theta_s \cdot \partial \Omega_s}}{\frac{\partial \Phi_i}{\partial A}} \equiv \frac{\partial \Phi_s}{\Phi_i \cdot \cos \theta_s \cdot \partial \Omega_s} \approx \frac{\Phi_s}{\Phi_i \cdot \cos \theta_s \cdot \Omega_s} \quad (4.21)$$

Nachfolgend soll die Abhängigkeit der BRDF von den Winkelgrößen vorausgesetzt werden und die Schreibweise auf BRDF abgekürzt werden. Die Einheit der BRDF ist durch den inversen Raumwinkel sr^{-1} gegeben. In Abbildung 4.3 sind die geometrischen Größen der BRDF dargestellt. Der ursprüngliche geometrische Vorschlag von *Nicodemus* enthält zusätzlich die Definition des Azimutwinkels ϕ_i der Einfallsebene; dieser Winkel wird in der vorliegenden Arbeit durch die Wahl eines entsprechenden Koordinatensystems Null gesetzt. Dementsprechend wird der einfallende Beleuchtungsstrahl durch seinen Winkel θ_i zur Ober-

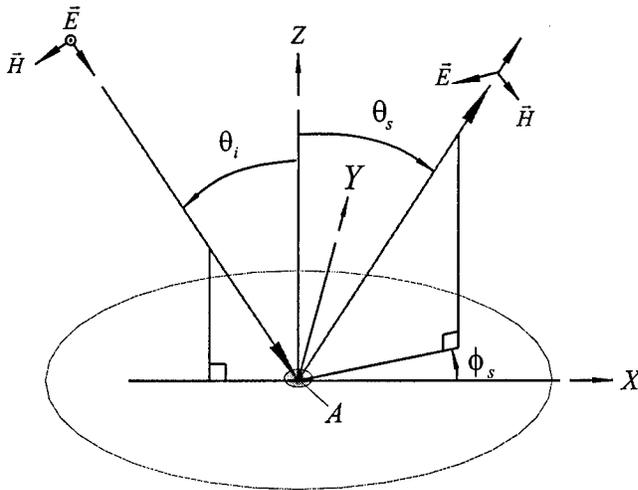


Abbildung 4.3: Darstellung der geometrischen Größen der BRDF.

flächennormale, seine Strahlungsleistung Φ_i und die Größe des Beleuchtungsflecks A auf der Oberfläche charakterisiert. Der einfallende Strahl und die Oberflächennormale bilden die Einfallsebene. Die Strahlungsleistung Φ_s des von der Oberfläche zurückgestreuten Lichtes wird durch den Raumwinkel Ω_s von einem Detektor gemessen. Die Position des durch den Raumwinkel Ω_s gegebenen Kegels wird in Bezug auf die Einfallsebene durch den Azimutwinkel ϕ_s und in Bezug auf die Oberfläche durch den Streuwinkel (oder auch Polarwinkel) θ_s beschrieben. Im Vorgriff auf die Erörterung der Streulichttheorien in Kapitel 4.3 soll an dieser Stelle die geometrische Definition des Polarisationszustandes des einfallenden Beleuchtungsstrahls und des reflektierten Strahls in Bezug auf die geometrische Definition der

BRDF festgelegt werden. In der Streulichtmeßtechnik werden häufig zwei Polarisationszustände für einen linear polarisiert einfallenden Beleuchtungsstrahl unterschieden: die sog. p-Polarisation, E-Feld Vektor ist parallel zur Einfallsebene und die s-Polarisation, E-Feld Vektor steht senkrecht zur Einfallsebene. Gleiches gilt für die Definition der Polarisationsrichtung der gestreuten Strahlung in Bezug auf die Detektor-Oberflächennormale.

In der Praxis stellt L_s die mittlere Streustrahlungsleistung Φ_s , aufgenommen über den projizierten Empfängerraumwinkel $\Omega_s \cos \theta_s$ der beleuchteten Fläche A , dar und E_i ist die mittlere einfallende Strahlungsleistung Φ_i , bezogen auf die beleuchtete Fläche A . Die korrekte differentielle Form von Gl. 4.21 ist für praktische Messungen infolge endlicher Empfängeraperturen des Meßaufbaus nicht realisierbar. Demzufolge wird die beste Approximation erreicht, wenn die Strahlungsleistung über die Empfängerapertur nahezu konstant ist. Verwendet man dagegen eine große Empfängerapertur, um einen fokussierten Strahl zu messen, führt die Approximation zu einem schlechten Ergebnis. Man ist daher bestrebt, besonders im Nahwinkelbereich (d.h. in der Nähe des direkten Reflexes) eine kleine Empfängerapertur zu realisieren. Aus der Definition der BRDF lassen sich folgende Eigenschaften ableiten:

- Die Funktionswerte der BRDF sind bidirektional, d.h. sie hängen sowohl vom Winkel des einfallenden Beleuchtungsstrahls θ_i als auch von der Richtung der Streustrahlung (θ_s, ϕ_s) ab.
- Die Definition der BRDF ist nur dann korrekt, wenn der Sichtbereich des Empfängers die gesamte beleuchtete Fläche überdeckt.
- Für eine ideal reflektierende Oberfläche ($\Phi_s = \Phi_i$ für $\theta_i = \theta_s$ und $\phi_s = 0$) nähert sich die BRDF des direkten Reflexes dem Wert $1/\Omega_s$.
- Die BRDF einer ideal *Lambertschen* Oberfläche mit der Reflektivität p gibt den Wert p/π über die gesamte Hemisphäre der Oberfläche. Ideal *Lambertsche* Oberfläche bedeutet, daß die Strahldichte L auf der Hemisphäre über der Oberfläche konstant ist.

Obwohl die BRDF hier nur für den Fall der Charakterisierung von an einer Oberfläche reflektierter Streustrahlung verwendet wird, kann diese auch zur Beschreibung der Streuverteilung in Transmission verwendet werden. Daher wird sie oft auch allgemeiner als **Bidirektionale Streulicht-Verteilungs-Funktion (BSDF)**⁶ bezeichnet.

Die graphische Darstellung der BRDF erfolgt im allgemeinen als logarithmischer Plot der BRDF-Werte über deren Streuwinkel. Bei dem Vergleich von BRDF-Messungen einer Oberfläche mit unterschiedlichen Einfallswinkeln zeigt sich eine mit steigenden Einfallswinkel zunehmende Asymmetrie der BRDF. Unter der Annahme, daß die BRDF „verschiebungsinvariant“ ist, kann die von *Harvey* [39] vorgeschlagene Transformation der Streuwinkel für einen Vergleich von BRDFs mit unterschiedlichen Einfallswinkeln verwendet werden. Die Transformation geht von einer mit dem Cosinus des Streuwinkels normierten Intensitätsmessung aus. Das wiederum entspricht der Definition der in der BRDF nach Gl. 4.21 enthaltenen Strahldichte L_s . Somit kann die Definition der BRDF nach Gl. 4.21 direkt verwendet werden. Die eigentliche Transformation erfolgt durch die Darstellung der BRDF-Werte bezogen

⁶In der Literatur wird die BSDF auch ohne den $\cos \theta_s$ Term verwendet; dann spricht man von der „cosinus-korrigierten BSDF“ [85].

auf die Winkeldifferenz $\Delta\beta$ nach folgender Gleichung

$$\Delta\beta = \beta_s - \beta_i = \sin\theta_s - \sin\theta_i, \quad (4.22)$$

und für BRDF-Werte außerhalb der Einfallsebene nach

$$\Delta\beta^2 = \sin^2\theta_i + \sin^2\theta_s - 2\sin\theta_i\sin\theta_s\cos\phi_s. \quad (4.23)$$

Eine entsprechende Interpretation der Eigenschaft der „Verschiebungsinvariante“ der BRDF wird im Zusammenhang mit der *Rayleigh-Rice* Streulichttheorie im nächsten Abschnitt erläutert.

Eine im Gegensatz zur BRDF winkelunabhängige Beschreibung der Lichtstreuung stellt das bereits in Kap. 2 vorgestellte **Totale Streulichtintegral (TIS)** dar. Es wird definiert als die Streustrahlungsleistung Φ_s , normiert mit der Summe aus direkt reflektiertem Strahlungsanteil Φ_r und gestreutem Strahlungsanteil. Wenn dabei die gesamte reflektierte und gestreute Strahlungsleistung im Halbraum über der Oberfläche erfaßt wird, und die Reflektivität p der Oberfläche bekannt ist, kann der TIS-Wert auch aus der eingestrahlenen Leistung und der integrierten Streustrahlungsleistung berechnet werden.

$$TIS = \frac{\Phi_s}{\Phi_r + \Phi_s} = \frac{\Phi_s}{p \cdot \Phi_i} \quad (4.24)$$

Der TIS-Wert kann auch durch Integration aus der BRDF gewonnen werden. Problematisch ist hierbei das Festlegen der Integrationsgrenzen, d.h. welcher Strahlungsanteil wird dem reflektierten Anteil und welcher dem gestreuten Anteil zugeordnet. Der amerikanische Standard ASTM E1392 [4] empfiehlt für die Integration des gestreuten Strahlungsanteils einen Winkelbereich von $\theta_s = 2.5^\circ$ bis 70° . Demnach ergibt sich für eine isotrope Oberfläche der TIS-Wert aus der BRDF, gemessen in der Einfallsebene mit

$$TIS = \frac{2\pi}{p} \int_{\theta_s=2.5^\circ}^{70^\circ} BRDF(\theta_i, \theta_s, \phi_s) \cdot \cos(\theta_s) \cdot \sin(\theta_s) \, d\theta_s. \quad (4.25)$$

Im Zusammenhang mit der Reflektivität werden oft auch die Begriffe **Albedo** und **HDR** gebraucht. Sie sollen daher im folgenden kurz erläutert werden. Der Begriff *Albedo* wurde von den Astronomen eingeführt und ist analog zur Reflektivität definiert als das Verhältnis von der an einer Oberfläche reflektierten Strahlungsleistung zur einfallenden Strahlungsleistung. Die richtungsabhängige Reflektivität einer Oberfläche bzw. eines Materials wird dagegen häufig als *Hemispherical Directional Reflectance* (HDR) bezeichnet und stellt die Reflektivität in Abhängigkeit vom Einfallswinkel der einfallenden Strahlung dar.

$$HDR(\theta_i, \phi_i) = \int \frac{\Phi_s}{\Phi_i} d\theta_s d\phi_s = \int BRDF(\theta_i, \phi_i, \theta_s, \phi_s) \cdot \cos(\theta_s) \cdot d\Omega_s \, d\theta_s d\phi_s \quad (4.26)$$

4.3 Modellierung der Lichtstreuung an glatten Oberflächen

Streulichtbasierte Oberflächenprüfverfahren lassen im Gegensatz zu bildgebenden Prüfverfahren keinen direkten Rückschluß von der Messung auf die Oberflächentopographie zu. Die Auswertung von Streulichtmessungen erfordert daher Verfahren, die einen Rückschluß von gemessenen Streuverteilungen auf die gewünschten Oberflächenkenngrößen zulassen. In diesem Abschnitt soll ein beugungstheoretischer Ansatz zur Inversion des Streuproblems an glatten Oberflächen vorgestellt werden.

Geht man von Oberflächenmikrostrukturen aus, deren Höhen deutlich kleiner als die Lichtwellenlänge und deren laterale Ausdehnungen größer als die Lichtwellenlänge sind, können beugungstheoretische Ansätze zur Beschreibung der auftretenden Streuung verwendet werden. Streulichttheorien, die auf der Lichtbeugung an Mikrostrukturen beruhen, lassen sich wiederum in skalare und vektorielle Ansätze unterscheiden. Skalare Theorien berücksichtigen nicht die Polarisation der einfallenden und gestreuten Strahlung bei der Modellierung der Interaktion der EM-Welle mit der Oberfläche. Ein Beispiel für die Anwendung der skalaren Streulichttheorie ist die bereits erwähnte Beziehung nach [23] zwischen quadratischer Mittenrauheit und dem Verhältnis von totalem Streulichtintegral zu einfallender Strahlungsleistung, basierend auf der skalaren Fernfeldlösung (Fraunhofer-Approximation) des Kirchhoffschen Beugungsintegral.

$$TIS = \frac{\Phi_s}{\Phi_r} = \left(\frac{4\pi R_q \cos\theta_i}{\lambda} \right)^2 \quad (4.27)$$

Nachteilig bei dieser skalaren Streulichttheorie ist zum einen deren Unabhängigkeit vom Anstieg der Mikrostrukturen der Oberfläche und zum anderen deren theoretische Beschränkung auf den Nahwinkelbereich. Aufgrund der starken Abhängigkeit winkelaufgelöster Streuung vom Anstieg der Oberflächenmikrotopographie eignen sich skalare Streulichttheorien nicht für eine exakte Modellierung winkelaufgelöster Streuung [31].

Die Anwendung von vektoriellen Beugungstheorien erlaubt zum einen die Berücksichtigung der Polarisation der einfallenden und gestreuten Strahlung als auch die Berücksichtigung von statistischen Eigenschaften der Oberfläche. Eine vektorielle Beugungstheorie, die einen Zusammenhang zwischen Oberflächenstatistik und winkelaufgelöster Streuverteilung beschreibt, ist die *Rayleigh-Rice vector perturbation theory* (RR-Theorie) [20]. Die RR-Theorie ist invertierbar und läßt entsprechend Gl. 4.28 eine Berechnung der spektralen Leistungsdichtefunktion S_2 einer Oberfläche aus deren Streulichtverteilung $BRDF$ zu.

$$S_2(f_x, f_y) = \frac{\lambda^4}{16\pi^2} \cdot \frac{BRDF(\theta_s, \phi_s)}{\cos\theta_i \cdot \cos\theta_s \cdot Q(\theta_s, \phi_s)}. \quad (4.28)$$

Anschaulich läßt sich der Grundgedanke der RR-Theorie wie folgt darstellen. Eine statistische Oberflächentopographie kann als eine Zusammensetzung von superpositionierten Sinuskomponenten mit unterschiedlicher Amplitude, Phase und Periode beschrieben werden. Die Streuverteilung einer solchen Fourierzerlegung ergibt sich dann aus der jeweils ersten Beugungsordnung der einzelnen Sinuskomponenten [31]. Demzufolge ist der Zusammenhang zwischen Streuwinkel und Oberflächenortsfrequenz durch die Gittergleichung der

ersten Beugungsordnung gegeben.

$$\begin{aligned} f_x &= \frac{\sin \theta_s \cdot \cos \phi_s - \sin \theta_i}{\lambda} \\ f_y &= \frac{\sin \theta_s \cdot \sin \phi_s}{\lambda} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Es handelt sich daher um eine Beugungstheorie erster Ordnung. Der vektorielle Charakter der RR-Theorie wird durch die Funktion Q beschrieben. Die Funktion Q modelliert das winkelabhängige Polarisationsverhalten und stellt einen Reflektivitätsfaktor in Abhängigkeit von Material, Wellenlänge, Bestrahlungswinkel, Detektionswinkel, Polarisations-eigenschaft der Lichtquelle und von der Analysatoreigenschaft des Detektors dar. In Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung der einfallenden Strahlung und der Analysatorrichtung des Detektors setzt sich Q aus den folgenden Teilfunktionen zusammen:

$$\begin{aligned} Q_{ss} &= \left| \frac{(\epsilon - 1) \cos \phi_s}{(\cos \theta_i + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_i})(\cos \theta_s + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s})} \right|^2 \\ Q_{sp} &= \left| \frac{(\epsilon - 1) \sin \phi_s \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s}}{(\cos \theta_i + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_i})(\epsilon \cos \theta_s + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s})} \right|^2 \\ Q_{ps} &= \left| \frac{(\epsilon - 1) \sin \phi_s \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s}}{(\epsilon \cos \theta_i + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_i})(\cos \theta_s + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s})} \right|^2 \\ Q_{pp} &= \left| \frac{(\epsilon - 1)(\sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s} \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_i} \cos \phi_s - \epsilon \sin \theta_i \sin \theta_s)}{(\epsilon \cos \theta_i + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_i})(\epsilon \cos \theta_s + \sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta_s})} \right|^2, \end{aligned} \quad (4.30)$$

wobei der erste Index von Q für die Polarisationsrichtung der Lichtquelle und der zweite Index für die Analysatorrichtung steht. Die relative Dielektrizitätskonstante ϵ ist das Produkt der Dielektrizitätskonstante des Oberflächenmaterials ϵ_o und der Dielektrizitätskonstante des umgebenden Mediums ϵ_u . Bei Verwendung eines polarisationsunempfindlichen Detektors ergibt sich Q mit

$$Q_x = Q_{xp} + Q_{xs} \quad \text{mit } x = \{s, p\}, \quad (4.31)$$

wobei x für die Polarisationsrichtung der einfallenden Strahlung steht.

Für eine Anwendung der RR-Theorie müssen die folgenden Voraussetzungen erfüllt sein:

- Aufgrund des beugungstheoretischen Ansatzes muß die laterale Ausdehnung der Oberflächenstrukturen größer oder gleich der Wellenlänge sein.
- Die Oberflächenrauheit muß deutlich kleiner als die Wellenlänge sein, um das sog. „Smooth Surface Criterion“ $(\frac{4\pi R_q \cos \theta_i}{\lambda})^2 \ll 1$ einzuhalten.
- Die beobachtete Streuung darf nur durch die Mikrotopographie der Oberfläche verursacht sein.
- Die Dielektrizitätskonstante (Permittivitätszahl) ϵ muß über den betrachteten Oberflächenausschnitt konstant sein und den Eigenschaften isotrop (damit auch skalar), linear (unabhängig vom Feld) und homogen (nicht ortsabhängig) genügen [11].

Weiterhin können die folgenden Eigenschaften aus Gl. 4.28 und Gl. 4.29 abgeleitet werden und zur experimentellen Verifikation der anwendungsspezifischen Gültigkeit der RR-Theorie verwendet werden.

- **Wellenlängenskalisierung** : Bei Änderung der Beleuchtungswellenlänge λ darf sich die resultierende PSD nicht ändern (ausgenommen die Änderung der Bandbegrenzung der Ortsfrequenzen aufgrund der Wellenlängenänderung).
- **Verschiebungsinvarianz** : Bei Änderung des Einfallswinkel muß die resultierende PSD gleich bleiben (ausgenommen die Änderung der Bandbegrenzung der Ortsfrequenzen aufgrund des geänderten Einfallswinkels).
- **Symmetrie** : Die aus der BRDF berechnete PSD muß nach Definition der PSD symmetrisch sein. Mit zunehmendem Einfallswinkel steigt dagegen die Asymmetrie der BRDF.

Zusammenfassend kann vermerkt werden, daß die RR-Theorie eine einfache Methode zur Inversion des Streuproblems für glatte Oberflächen zur Verfügung stellt. Ausgenommen den Faktor Q ist die Streulichtverteilung proportional dem Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Oberflächentopographie, woraus bei Gültigkeit der RR-Theorie eine direkte Meßbarkeit der spektralen Zerlegung der Oberfläche folgt. Ein Rückschluß von der Streulichtverteilung auf die Oberflächentopographie im Ortsraum ist verfahrensbedingt aufgrund der fehlenden Phaseninformation nicht möglich. Abbildung 4.4 faßt die aus der RR-Theorie resultierenden Zusammenhänge zwischen Oberflächenstreuung, Oberflächentopographie und Oberflächenkenngrößen graphisch zusammen.

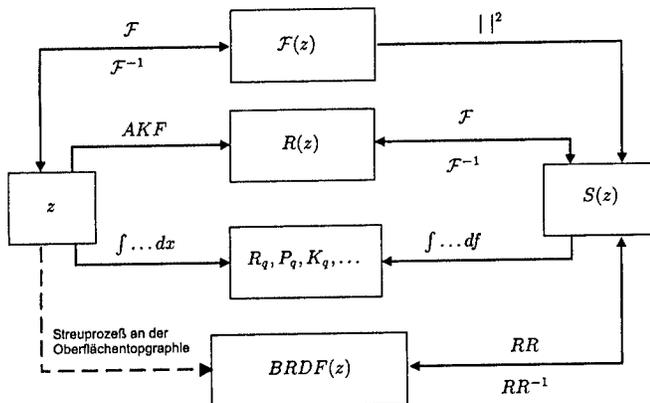


Abbildung 4.4: Graphische Zusammenfassung des Zusammenhangs zwischen Oberflächenstreuung und Oberflächenkenngrößen nach der RR-Theorie.

4.4 Modellierung der Lichtstreuung an Partikeln

Die nachfolgenden theoretischen Ausführungen zur Modellierung des Streulichtes an Partikeln sind auf den Anteil beschränkt, der für das Verständnis der im Rahmen der Arbeit durchgeführten Messungen notwendigen ist. Für eine ausführliche Erläuterung der verwendeten Streulichtapproximationen sei auf die Literatur [15] verwiesen.

Als Vergleichsgröße für die meßtechnische Erfassung der Partikelstreuung und deren Berechnung soll der Partikelstreuquerschnitt C_s verwendet werden. Dieser ist definiert als das Verhältnis von an einem Partikel gestreuter Strahlungsleistung P_s zu einfallender Bestrahlungsstärke E_i . Betrachtet man die Streuung nicht integral über den gesamten Kugelraum, ist die mit einem Empfänger gemessene Strahlungsleistung von dessen Apertur abhängig. Um dennoch eine vergleichbare quantitative Aussage treffen zu können, soll für winkelauflösende Messungen der differentielle Partikelstreuquerschnitt $dC_s/d\Omega$ verwendet werden.

$$C_s = \frac{P_s}{E_i}$$

$$\frac{dC_s}{d\Omega} = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left(\frac{C_s}{\Omega} \right) \approx \frac{P_s \cdot R_s^2}{E_i \cdot A_s} = \frac{E_s \cdot R_s^2}{E_i} \quad (4.32)$$

Das einfallende Licht sei durch eine monochromatische ebene elektromagnetische Welle beschrieben. Die Wellenzahl k für die Ausbreitung einer elektromagnetischen Welle in einem Medium mit dem Brechungsindex n_u ist definiert mit

$$k = \frac{2\pi \cdot n_u}{\lambda} \quad (4.33)$$

Durch Normierung des Partikelbrechungsindex n_p mit dem Brechungsindex des umgebenden Mediums n_u erhält man den relativen Brechungsindex m .

$$m = \frac{n_p}{n_u} \quad (4.34)$$

Unter der Annahme eines p-polarisierten Beleuchtungsstrahls (lineare Polarisation, bei der die Schwingungsrichtung des E-Feldes in der Einfallsebene liegt) ergibt sich der Partikelstreuquerschnitt C_s aus der Summe der Beträge der Poyntingvektoren für den parallel polarisierten Streuanteil $S_{||}$ und den senkrecht polarisierten Streuanteil S_{\perp} normiert mit dem Quadrat der Wellenzahl k [15]. Die beiden Poyntingvektoren beschreiben die gestreute elektromagnetische Welle für senkrechte und parallele Polarisation. Somit ist eine winkelabhängige Modellierung der Partikelstreuung sowohl für unterschiedliche einfallende Polarisationsrichtungen als auch für unterschiedliche Detektionsebenen (um Azimutwinkel ϕ_s gedrehte Ebene) möglich. Den totalen Partikelstreuquerschnitt erhält man durch Integration des Streuquerschnittes über den gesamten Kugelraum.

$$C_s = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{(|S_{\perp}|^2 \sin^2 \phi_s + |S_{||}|^2 \cos^2 \phi_s)}{k^2} \sin \theta_s d\theta_s d\phi_s \quad (4.35)$$

Für eine Modellierung der Streuung wird nachfolgend von einer homogenen Kugel mit dem Radius r_p und dem Brechungsindex n_p ausgegangen. Zur Berechnung der Streuung wird die

relative Kugelgröße x_p verwendet, definiert als das Verhältnis von Kugelradius zur Wellenlänge der einfallenden Strahlung.

$$x_p = k \cdot r_p \quad (4.36)$$

Für Partikelgrößen, die kleiner als die Wellenlänge $|m|x_p \ll 1$ sind, kann die Approximation nach *Rayleigh* zur Beschreibung der Streuung an einem Partikel verwendet werden. Die entsprechenden Amplitudenfunktionen für parallel S_{\parallel} und senkrecht polarisierten Streuteil S_{\perp} sind definiert mit

$$S_{\parallel} = \frac{3}{2}a_1, \quad S_{\perp} = \frac{3}{2}a_1 \cos \theta, \quad a_1 = -i \frac{2x_p^3}{3} \cdot \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}, \quad (4.37)$$

wobei S_{\parallel} konstant ist und nur S_{\perp} vom Streuwinkel θ , abhängig ist. In Abbildung 4.5 sind drei Streuquerschnitte für p-polarisierten, s-polarisierten und unpolarisierten Lichteinfall einer nichtleitenden Kugel mit einem Brechungsindex von $n_p = 1.59$ und einem Kugelradius von 150nm dargestellt. Auffällig ist, daß bei p-Polarisation der einfallenden Beleuchtung,

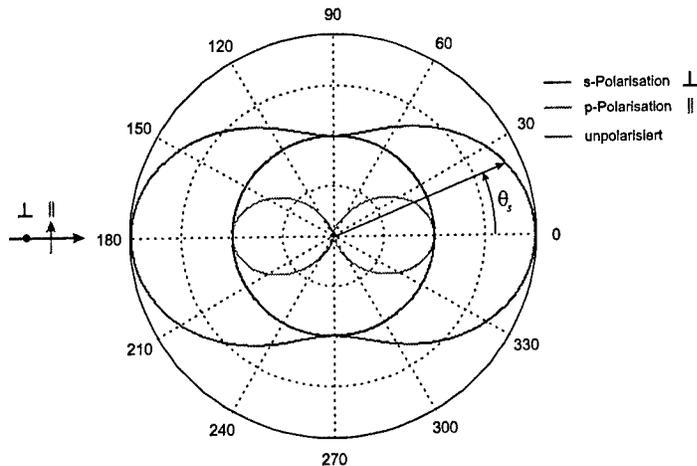


Abbildung 4.5: Modellierung der winkelaufgelösten Streuung an einem Partikel nach *Rayleigh* für $r_p = 150nm$, $n = 1.59$ und $\lambda = 635nm$

aufgrund der Dipolwirkung des Partikels, keine Streuung der elektromagnetischen Welle in Schwingungsrichtung des E-Feldes möglich ist. Dieses polarisationsabhängige Streuverhalten kann für eine meßtechnische Trennung von Partikelstreuung von anderen Streuquellen (z.B. Topographiestreuung) ausgenutzt werden.

Für Partikel, die nicht der Bedingung $|m|x_p \ll 1$ genügen, ist eine Modellierung der Streuung nach der *Mie-Theorie* möglich. Die *Mie-Theorie* stellt gegenüber der *Rayleigh-Approximation* eine exakte Lösung des Streuproblems für beliebige Kugelradien dar. Eine Berechnung der Streuamplituden S_{\parallel} und S_{\perp} erfolgt durch eine Reihenentwicklung mit den Streukoeffizienten

a_n und b_n und den winkelabhängigen Kugelfunktionen π_n und τ_n .

$$S_{\parallel} = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \quad (4.38)$$

$$S_{\perp} = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \quad (4.39)$$

Auf die Darstellung der Berechnung der Streukoeffizienten a_n , b_n und der Kugelfunktionen π_n , τ_n sei an dieser Stelle unter Hinweis auf die Literatur [7,82] verzichtet. Beispielhaft ist in Abbildung 4.6 die winkelabhängige Streuung, nach Mie, an einem Partikel mit einem Durchmesser von $0.6 \mu\text{m}$ zu sehen. Bei dieser Partikelgröße ist der Anteil der Vorwärtsstreuung

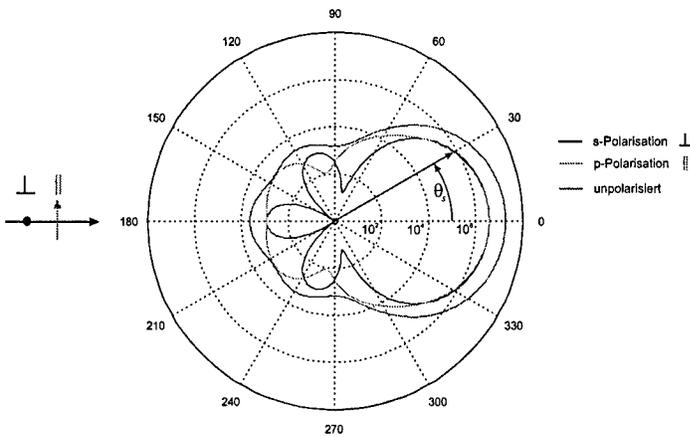


Abbildung 4.6: Modellierung der winkelaufgelösten Streuung an einem Partikel nach der Mie-Theorie für $r_p = 300\text{nm}$, $n_p = 1.59$ und $\lambda = 635\text{nm}$

größer als der Rückstreuanteil und insbesondere der s-polarisierte Streuanteil weist deutliche Interferenzerscheinungen auf.

Vergleicht man *Rayleigh*-Streuung und *Mie*-Streuung anhand des totalen Streuquerschnittes, zeigt sich eine gute Übereinstimmung bis ca. $|m|x_p = 1$. Für die in Abbildung 4.7 dargestellten totalen Integrale der Streuquerschnitte für Kugeldurchmesser von 10 nm bis $10 \mu\text{m}$ ist bis zu einem Durchmesser von 130 nm keine Abweichung zwischen *Rayleigh* und *Mie* zu beobachten. Ferner ist festzustellen, daß im Bereich der Gültigkeit der *Rayleigh*-Approximation die Partikelstreuung proportional zum Volumenquadrat des Partikels ist, und daß für Kugeldurchmesser größer als die Wellenlänge die Partikelstreuung als proportional zum Flächenquadrat angenommen werden kann.

Beim Vergleich der winkelaufgelösten Streuquerschnitte des Beispiels aus Abbildung 4.7 zeigt sich bereits ab einem Kugeldurchmesser von ca. 100 nm eine deutliche Abweichung zwischen *Mie*- und *Rayleigh*-Streuverteilung. Bei der *Mie*-Streuverteilung ändert sich mit zunehmender Partikelgröße das Verhältnis von Vorwärts- zu Rückwärtsstreuung, außerdem

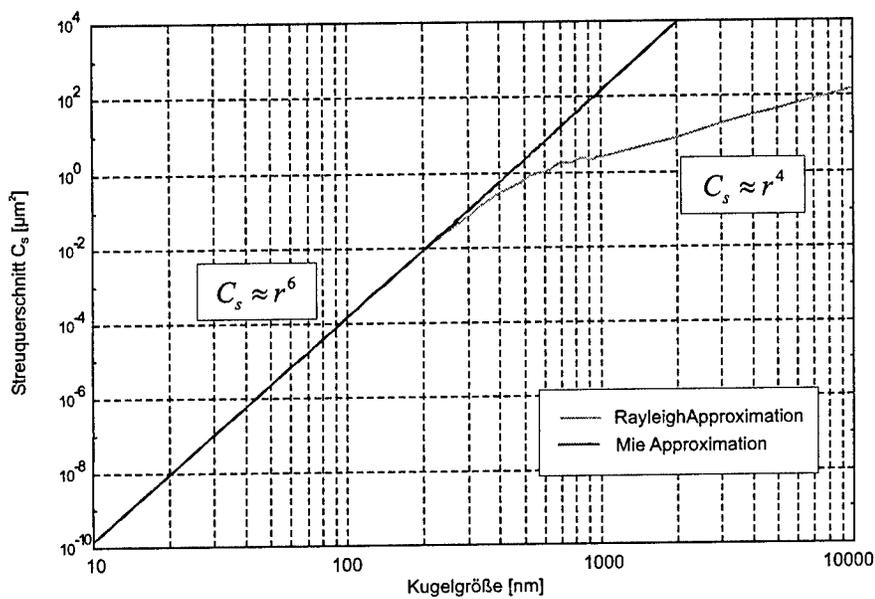


Abbildung 4.7: Vergleich von *Rayleigh*- und *Mie*-Theorie anhand des Streuquerschnittes C_s in Abhängigkeit vom Kugeldurchmesser für einen Brechungsindex der Kugel von 1.59 und eine Wellenlänge von 635 nm.

treten mit Annäherung der Partikelgröße an die Wellenlänge Interferenzerscheinungen innerhalb des Partikels hervor. Beide Phänomene können mit der *Rayleigh*-Approximation nicht modelliert werden. Der Anwendungsbereich der *Rayleigh*-Approximation erstreckt sich dementsprechend auf Partikelgrößen, die deutlich kleiner als die Wellenlänge sind.

4.5 Analyse der Lichtstreuung durch Mustererkennung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, daß es möglich ist, unter bestimmten Voraussetzungen das direkte Streuproblem, d.h. die Berechnung der Streuverteilung für eine vorgegebene Oberflächentopographie, Oberflächenstatistik oder für deterministische Strukturen, zu lösen. Auch für die Streuung an Partikeln existieren rigorose Lösungen für homogene und inhomogene Kugeln, Ellipsoide, Zylinder und asymmetrische Partikel.

Aus der Sicht der Anwendung der Streulichtmeßtechnik steht jedoch das inverse Streuproblem, d.h. die Bestimmung der Eigenschaften von Oberflächen, Strukturen und Partikeln aus der Streuverteilung, im Vordergrund. Leider ist die Lösung des inversen Streuproblems in den meisten Fällen, wenn überhaupt möglich, mehrdeutig. Als Beispiel hierfür sei die in Kapitel 2 aufgeführte Approximation von *Beckmann* und *Spizzichino* für raue stochastische Oberflächen genannt. Mit Hilfe dieser Streulichttheorie kann für eine gegebene Oberflächenstatistik die Streulichtverteilung berechnet werden. Bei der Inversion dieses Ansatzes tritt jedoch das Problem auf, daß sich die Korrelationslänge und die quadratische Mittenrauigkeit nicht trennen lassen. Die damit entstandene Mehrdeutigkeit verhindert die separate Bestimmung dieser Oberflächenkenngrößen aus der Streulichtverteilung.

Wenn keine modellbasierte oder rigorose Lösung des inversen Streuproblems gefunden werden kann müssen empirische Ansätze zu dessen Lösung verwendet, und in Übereinstimmung zu experimentellen Daten gebracht werden. Diese Ansätze können und sollten, wenn möglich, auch auf bekannten Lösungen des direkten Streuproblems beruhen. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein zweistufiger Ansatz verwendet. Zuerst werden aus den Streulichtverteilungen signifikante Merkmale berechnet und anschließend wird eine Klassifikation im Merkmalsraum vorgenommen. Alternativ können natürlich auch andere Verfahren der Mustererkennung wie univariate und multivariate Regression oder neuronale Klassifikation bzw. Regression verwendet werden. Das in dieser Arbeit verwendete statistische Klassifikationsverfahren wird im Anhang A erörtert.

Voraussetzung für eine Lösung des inversen Streuproblems mit Hilfe von Klassifikationsverfahren ist das Vorhandensein von geeigneten Merkmalen zur Beschreibung der unterschiedlichsten Ausprägungen von Streulichtverteilungen. Im einfachsten Fall kann hierfür die Streulichtverteilung selbst verwendet werden. Dieses ist jedoch für Streulichtverteilungen mit einer großen Anzahl von Stützstellen und einem großen Dynamikumfang der Meßwerte im allgemeinen nicht praktikabel. Daher ist es notwendig, möglichst wenige Merkmale zu finden, welche die jeweilige Observation kompakt und signifikant beschreiben. In den folgenden Abschnitten werden verschiedene Merkmalsklassen definiert. Es werden sowohl statistische Kenngrößen als auch Parameter von Approximationsfunktionen als Merkmale betrachtet. Die Beurteilung der Güte der einzelnen Merkmale bezüglich deren Trennfähigkeit kann in Verbindung mit dem in Anhang A beschriebenen Klassifikationsverfahren erfolgen. Für Merkmale, welche auf einer Approximation der Streulichtverteilung durch bekannte Funktionen beruhen, kann das Approximationsergebnis außerdem durch einen Anpassungstest beurteilt werden. Hierfür soll der χ^2 -Test verwendet werden [73]. Der Wert der Teststatistik für die Güte der Approximation der Punkte P_i mit einer Funktion $f(t_i)$ ergibt sich demnach aus der Summe der Fehlerquadrate gewichtet mit der Varianz σ_i^2 des Meßpunktes P_i .

$$TS_{\chi^2} = \sum_{i=1}^n \frac{(P_i - f(t_i))^2}{\sigma_i^2}, \quad (4.40)$$

Die Varianz σ_i^2 kann experimentell aus Wiederholungsmessungen ermittelt, oder mit Hilfe des jeweiligen Sensormodells geschätzt werden.

4.5.1 Statistische Momente als Merkmale der Streulichtverteilung

Eine winkelunabhängige Charakterisierung der Verteilung der Streulichtintensitätswerte ist mit Hilfe von statistischen Momenten möglich [77], s. Tabelle. 4.5.1. Ein Vorteil dieser Mo-

Tabelle 4.1: Statistische Momente als Merkmale der BRDF und ihre empirische Interpretation

Merkmal	Interpretation
$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$	arithmetischer Mittelwert der BRDF-Werte
$\bar{d} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i - \bar{x} $	mittlere absolute Abweichung der BRDF-Werte
$v = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$	Varianz der BRDF-Werte
$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$	Standardabweichung der BRDF-Werte
$s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma}\right)^3$	Schiefe bzw. Asymmetrie der Verteilung der BRDF-Werte, $s = 0$ entspricht einer symmetrischen Verteilung, z.B. der Normalverteilung
$k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma}\right)^4 - 3$	Abflachung der Verteilung der BRDF-Werte, $k = 0$ entspricht der Normalverteilung

mente liegt in ihrer leichten Berechenbarkeit. Nachteilig dagegen ist, daß die statistischen Momente ausschließlich die Häufigkeitsverteilung der BRDF-Werte, unabhängig von den Positionen der zugehörigen Streulichtmeßstellen, beschreiben. Somit können unterschiedlichste Ausprägungen der Streulichtverteilung gleiche statistische Momente ergeben. Bei Einhaltung der notwendigen Voraussetzungen der *Rayleigh-Rice* Approximation lassen sich die statistischen Momente der Streulichtverteilung als statistische Momente der PSD der Oberfläche interpretieren. Mit Hilfe der in Kapitel 4.1 aufgezeigten Zusammenhänge zwischen der PSD und einigen Oberflächenkenngrößen, ist beispielsweise der Mittelwert der Streulichtverteilung proportional zur quadratischen Mittenrauheit R_q der Oberflächentopographie. Eine solche physikalische Interpretationsmöglichkeit der statistischen Momente der BRDF ist im allgemeinen jedoch nicht gegeben und kann nur mit der Gültigkeit entsprechender Streulichtapproximationen angenommen werden.

4.5.2 Zirkulare Momente als Merkmale der Streulichtverteilung

Um den genannten Nachteil der Positionsunabhängigkeit der linearen statistischen Momente zu überwinden, werden in diesem Abschnitt statistische Merkmale basierend auf zirkularer Statistik definiert, welche sowohl den Intensitätswert als auch dessen Position auf der

Hemisphere berücksichtigen. Ausgangspunkt für die Definition der Merkmale ist die zirkulare (im R^2), bzw. sphärische (im R^3) Statistik [34, 35], die auf Daten in Form von zwei- bzw. dreidimensionalen axialen oder vektoriellen Orientierungsmessungen beruht und deren Häufigkeitsverteilung analysiert. Die Daten werden dabei als Winkelhäufigkeiten auf dem Einheitskreis bzw. der Einheitskugel dargestellt. Demnach erfordert die Anwendung dieser Statistik auf Streulichtverteilungen eine Interpretation der Intensitätswerte der BRDF als Häufigkeitswerte [72, 74]. Betrachtet man den BRDF-Wert eines bestimmten Raumwinkels als eine Summe von diskreten Elementarereignissen, ist diese Voraussetzung zur Anwendung der zirkularen Statistik gegeben. Aus physikalischer Sicht läßt sich ein solches Elementarereignis als die Anzahl von Photonen definieren, die notwendig sind, um an einem Strahlungsdetektor eine meßbare Veränderung zu erzielen. Somit können die Werte der Streulichtverteilung so normiert werden, daß sie sich als Vielfache eines Elementarereignisses ergeben, s. Abb. 4.8.

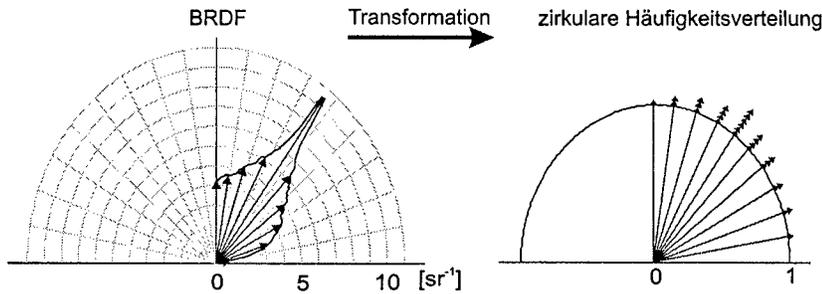


Abbildung 4.8: Interpretation der BRDF als zirkulare Häufigkeitsverteilung. Die Anzahl der Dreiecke im rechten Bild symbolisiert die Anzahl von diskreten Elementarereignissen.

Mathematisch kann diese Transformation wie folgt durch einen Winkelwiederholungswert n_j beschrieben werden

$$n_j = \frac{BRDF(\theta_j) - \min(BRDF)}{\max(BRDF) - \min(BRDF)} * N_\Phi \quad n_s = \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j, \quad (4.41)$$

wobei θ_j der j -te Streuwinkel θ_s ($j = 1..N_{\theta_s}$) ist, N_Φ ist die Anzahl von diskreten Unterteilungen des Wertebereichs der BRDF und n_s ist die Gesamtanzahl der Elementarereignisse. Basierend auf n_j und dem zugehörigen Streuwinkel θ_j kann die *mittlere Richtung* $\bar{\theta}$ einer Streulichtverteilung berechnet werden.

$$C = \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j \cos \theta_j \quad S = \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j \sin \theta_j \quad R^2 = C^2 + S^2$$

$$\bar{\theta} = \begin{cases} \tan^{-1}(S/C) & S > 0, \bar{C} > 0 \\ \tan^{-1}(S/C) + \pi & C < 0 \\ \tan^{-1}(S/C) + 2\pi & S < 0, \bar{C} > 0 \end{cases} \quad (4.42)$$

Für eine BRDF mit einer spekularen Komponente entspricht dieser Winkel dem Einfallswinkel θ_i . Mit Hilfe der *mittleren resultierenden Länge* \bar{R} kann analog zur linearen Statistik die *zirkulare Varianz* v_z und die *zirkulare Standardabweichung* σ_z berechnet werden.

$$\bar{R} = R/n_s \quad v_z = 1 - \bar{R} \quad \sigma_z = \sqrt{-2 * \log(1 - v_s)} \quad (4.43)$$

Die *zentrierten zirkularen Momente* m_p der Ordnung p werden wie folgt definiert

$$m_p = 1/n_s * \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j \cos(p \cdot (\theta_j - \bar{\theta})). \quad (4.44)$$

Aus den zirkularen Momenten können weitere charakteristische Merkmale der zirkularen Verteilung berechnet werden. Die *zirkulare Dispersion* d_z beispielsweise ist ein Maß für die Verbreiterung der Verteilung der Winkelhäufigkeiten.

$$d_z = (1 - m_2)/2 * \bar{R}^2 \quad (4.45)$$

Die Berechnungen der *zirkularen Schiefe* s_z und der *zirkularen Kurtosis* k_z sind nach [35] definiert als

$$s_z = \frac{m_2 * \sin(\mu_2 - 2\bar{\theta})}{(1 - \bar{R})^{\frac{3}{2}}} \quad k_z = \frac{(m_2 * \cos(\mu_2 - 2\bar{\theta}) - \bar{R}^4)}{(1 - \bar{R})^2}, \quad (4.46)$$

wobei μ_2 aus dem zweiten *unzentrierten trigonometrischen Moment* berechnet wird.

$$\begin{aligned} \bar{C}_p &= 1/n_s * \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j \cos(p\theta_j) & \bar{S}_p &= 1/n_s * \sum_{j=1}^{N_{\theta_s}} n_j \sin(p\theta_j) \\ \mu_2 &= \begin{cases} \tan^{-1}(\bar{S}_2/\bar{C}_2) & \bar{S}_2 > 0, \bar{C}_2 > 0 \\ \tan^{-1}(\bar{S}_2/\bar{C}_2) + \pi & \bar{C}_2 < 0 \\ \tan^{-1}(\bar{S}_2/\bar{C}_2) + 2\pi & \bar{S}_2 < 0, \bar{C}_2 > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Aus praktischer Sicht sollten für BRDF-Messungen mit einer Dynamik von mehreren Dekaden die BRDF-Werte vor der Merkmalsberechnung logarithmiert werden. Das ist notwendig, um einerseits die Winkelverteilung des spekularen Anteils nicht übermäßig stark zu gewichten, und andererseits, um numerische Probleme bei der Berechnung der Merkmale zu vermeiden. Mit Hilfe der sphärischen Statistik [34] können analog zu dem geschilderten Vorgehen für die zirkularen Momente im R^2 auch sphärische Momente im R^3 definiert werden. An dieser Stelle soll auf die Darstellung des entsprechenden Formelapparates verzichtet werden, da ein Vergleich der Merkmale auf der Basis von zweidimensionalen BRDF-Schnitten erfolgen soll.

4.5.3 Modellbasierte Merkmale der Streulichtverteilung

Eine weitere Möglichkeit zur Merkmalsgewinnung von Streulichtverteilungen stellt die Modellierung der BRDF durch Funktionen dar, deren geschätzte Parameter als Merkmale verwendet werden. Aus der Computergrafik sind eine ganze Reihe von BRDF-Modellen bekannt, welche eine analytische Beschreibung der BRDF ermöglichen. In der Regel wird dabei eine Zerlegung der BRDF in einen spekularen, diffusen, rückstreuenden und einen volumenstreuenden Anteil vorgenommen.

$$f_{\text{brdf}} = f_{\text{diffus}} + f_{\text{rück}} + f_{\text{volumen}} + f_{\text{spekular}} \quad (4.48)$$

Eines der ältesten und auch bekanntesten Modelle ist das *Phong-Modell* [66]. An dieser Stelle soll eine modifizierte Variante des *Phong-Modells* von *Lafortune* [51] verwendet werden.

Dieses Modell ist mit

$$f_{\text{phong}}(\theta_s, \theta_i) = \underbrace{a_1 \frac{1}{\pi}}_{\text{diffus}} + \underbrace{a_2 \frac{a_3 + 2}{2\pi} \cos(\theta_s - \theta_i)^{a_3}}_{\text{spekular}} \quad (4.49)$$

definiert als die Summe aus einem diffusen Anteil, modelliert durch a_1 , und einem spekularen Anteil in Abhängigkeit von den Parametern a_2 und a_3 . Das *Phong*-Modell geht von einer Zentralsymmetrie um den Einfallswinkel herum aus. In Abbildung 4.9 sind zwei typische BRDF Verläufe und deren Approximation mit dem *Phong*-Modell dargestellt. In der

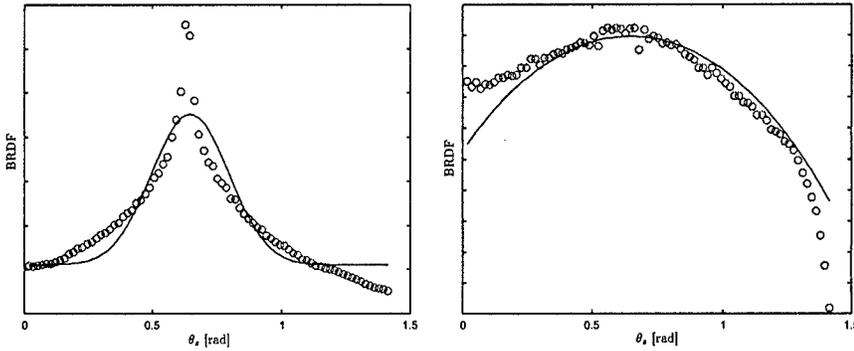


Abbildung 4.9: Zwei BRDF-Approximationen mit dem modifizierten *Phong* Modell (Kreise = BRDF-Meßpunkte, durchgezogene Linie = Approximation), l. Approximation einer BRDF mit spekularen Komponente, r. Approximation einer diffusen BRDF.

linken Abbildung ist zu erkennen, daß der in Gl. 4.49 als winkelunabhängiger Parameter a_1 definierte diffuse Anteil eine bessere Anpassung des Modells an die Meßwerte sowohl für den spekularen als auch für den ansteigenden diffusen Anteil verhindert. Die rechte Abbildung veranschaulicht außerdem den symmetrischen Modellansatz, d.h. die Asymmetrie der diffusen Komponente der BRDF kann nicht mit dem *Phong*-Modell beschrieben werden.

Eine flexiblere Approximation des spekularen und des diffusen Anteils ist mit dem Modell nach *Meister* [59] möglich. Es ist nach Gl. 4.50 definiert als die Summation über einen konstanten und einen winkelabhängigen diffusen Anteil und einen spekularen Anteil.

$$f_{\text{meister}}(\theta_s, \phi_s, \theta_i) = \underbrace{a_0 + a_1(\theta_i^2 + \theta_s^2) + a_2(\theta_i \theta_s)^2}_{\text{konst. + winkelabhängig diffus}} + \underbrace{a_3 \theta_i \theta_s \cos(\phi_s)}_{\text{Asymmetrie}} + \underbrace{a_4 e^{a_5(\theta_i \theta_s)^2} e^{-a_6(\theta_s - \theta_i)^2}}_{\text{spekular}} \quad (4.50)$$

Durch die Einbeziehung des Azimutwinkels ϕ_s kann außerdem eine Asymmetrie um das zentrierte Modell in azimutaler Richtung modelliert werden. Die Approximationen in Abbildung 4.10 veranschaulichen das bessere Anpassungsverhalten des *Meister*-Modells, besonders für einen nichtkonstanten und asymmetrischen diffusen Anteil in der BRDF. Aufgrund der Ste-

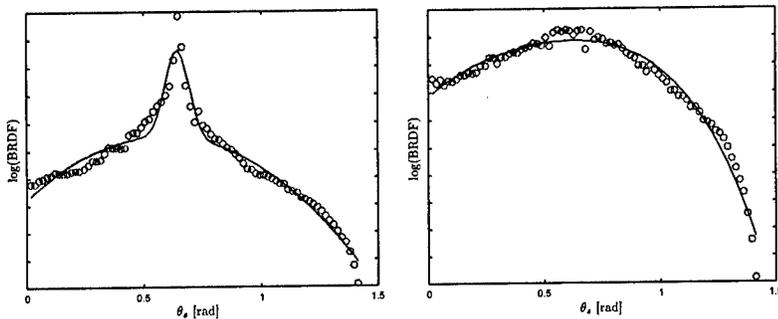


Abbildung 4.10: Approximationen von zwei BRDF-Messungen (Kreise = BRDF-Meßpunkte, durchgezogene Linie = Approximation), l. einer BRDF mit spekulärer Komponente, r. einer diffusen BRDF.

tigkeit der Modellfunktion verschlechtert sich jedoch das Approximationsergebnis mit steiler werdendem spekularem Anteil. Zudem nimmt die Anzahl der Meßpunkte mit schmäler werdendem spekularem Anteil ab, so daß der spekulare Anteil ein geringeres Gewicht in der L_2 -Approximation bekommt.

Als Approximationsverfahren für die beiden nichtlinearen Modelle *Phong* und *Meister* wird eine Minimierung der Summe der Residuenquadrate nach dem *Quasi-Newton* Verfahren [55, 84] verwendet. Für beide Modelle ergeben sich für die partiellen Ableitungen einfache analytische Ausdrücke. Somit muß der für die Optimierung nach dem *Quasi-Newton* Verfahren notwendige Gradient nicht durch numerische Differentiation berechnet werden, sondern kann durch Einsetzen in die analytischen Lösungen ermittelt werden.

4.5.4 Merkmalsgewinnung durch Splineapproximation

Im vorangegangenen Abschnitt wurde der Streulichtverteilung eine bestimmte modellbasierte Approximationsfunktion zugrundegelegt. Wenn man dagegen keine genaue Vorstellung von der Gestalt der Approximationsfunktion hat, kann man Splinekurven zur Approximation der Streulichtverteilung verwenden.

Allgemein setzt sich eine Splinekurve stückweise aus mehrfach stetig differenzierbaren Splinefunktionen zusammen [32, 52]. Um einen möglichst glatten Kurvenverlauf zu ermöglichen, muß für die einzelnen Kurvensegmente außerdem gefordert werden, daß die ersten k Ableitungen stetig aneinander anschließen. Häufig werden als Splinefunktionen polynomiale oder auch exponentielle Funktionen benutzt.

Die durch eine L_2 -Approximation berechneten Koeffizienten der Splinekurve stellen dann die Merkmale dar. Aus der Vielzahl der Darstellungsformen von Splines und den möglichen Splinefunktionen (s. [42, 57, 67]) sollen an dieser Stelle B-Spline-Kurven verwendet werden. Aus der Verwendung von B-Spline-Kurven ergeben sich folgende Vorteile für die Approximation von Streuverteilungen:

- Durch die Wiederholung von l Parameterwerten ($l \leq k$) im Knotenvektor reduziert sich die Stetigkeit einer B-Spline-Funktion auf $C^{(k-l-1)}$, d.h. durch die Wiederholung von $l = k - 1$ Parameterwerten für eine B-Spline-Funktion k -ter Ordnung wird ein Sprung in der ersten Ableitung der Funktion erzeugt. Damit ist es möglich, Streulichtverteilungen mit einem starken spekularen Anteil auch in Richtung des direkten Reflexes gut zu approximieren. Weiterhin kann nach der Approximation noch entschieden werden, ob eine solche Unstetigkeitsstelle notwendig ist oder nicht, ohne dabei die Anzahl oder die Anordnung der Parameter im Knotenvektor zu verändern. Die Unstetigkeit kann entfernt werden, indem die zugehörigen Koeffizienten gleich gesetzt werden.
- Die Randbereiche werden durch eine offene B-Spline-Kurve sehr gut approximiert, wenn der Anfangswert und der Endwert des Knotenvektors $k - 1$ -fach wiederholt wird.
- B-Spline-Kurven benötigen häufig weniger Kontrollpunkte als andere Darstellungsformen von Spline-Kurven (z.B. Bézier-Spline-Kurven) und ermöglichen damit eine kompaktere Darstellung, d.h. die Anzahl der Merkmale reduziert sich.

Eine B-Spline-Funktion (die Basis Funktion der B-Spline-Kurve) k -ter Ordnung ist ein segmentweise definiertes Polynom vom Grade $k - 1$, das an den Segmentgrenzen im allgemeinen C^{k-2} stetig ist. Die geordneten Parameterwerte (Knoten) t_i einer B-Spline-Funktion werden als Knotenvektor T geschrieben.

$$T = (t_1, t_2, \dots, t_{n+k-1}, t_{n+k}) \quad t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_{n+k} \quad (4.51)$$

Basierend auf dem Knotenvektor T wird als normalisierte B-Spline-Funktion $B_{i,k}(t)$ der Ordnung k folgender Zusammenhang zwischen der Splinefunktion der Ordnung k und $k - 1$ in rekursiver Schreibweise definiert:

$$\begin{aligned} \text{für } k = 1 \quad B_{i,1}(t) &= \begin{cases} 1 & \text{für } t_i \leq t \leq t_{i+1} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ \text{für } k > 1 \quad B_{i,k}(t) &= \frac{t-t_i}{t_{i+k-1}-t_i} B_{i,k-1}(t) + \frac{t_{i+k}-t}{t_{i+k}-t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(t) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Wird der Knotenvektor äquidistant gewählt, werden die B-Splines als *uniforme B-Splines* bezeichnet und entsprechend bei nichtäquidistantem Knotenvektor als *nicht-uniforme B-Splines*. Für die Berechnung der B-Spline-Funktion kann die Rekursionsformel entsprechend Gl. 4.52 verwendet werden, in der Praxis wird jedoch häufig der *de Boor* Algorithmus [24] zur Berechnung der Funktionswerte benutzt.

Als B-Spline-Kurve der Ordnung k bezeichnet man

$$S_k(t) = \sum_{i=1}^n a_i B_{i,k}(t), \quad (4.53)$$

wobei die B-Spline-Funktionen $B_{i,k}$ für einen nach Gl. 4.51 gegebenen Knotenvektor eine lineare Basis bilden. Die Punkte a_i werden als Kontrollpunkte oder *de Boor*-Punkte bezeichnet und stellen in diesem Fall die Merkmale dar. Anschaulich lassen sich die Punkte zu einem Polygon (auch *de Boor* Polygon genannt) verbinden, das den approximierten Funktionsverlauf grob beschreibt.

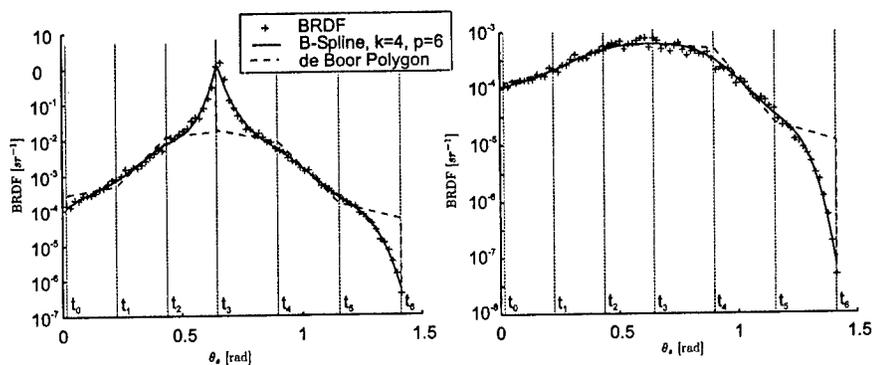


Abbildung 4.11: Darstellung von zwei B-Spline Approximationen vierter Ordnung mit sechs Segmenten, l. mit Unstetigkeitsstelle bei t_3 , r. ohne Unstetigkeitsstelle.

Die Approximation einer B-Spline-Kurve für N gegebene Meßwertpaare (y_j, x_j) einer Streulichtverteilung läßt sich nun als Minimierungsproblem des quadratischen Gesamtfehlers formulieren.

$$D_j^2 = (S_k(x_j) - y_j)^2 \quad D^2 = \sum_{j=1}^N D_j^2 \rightarrow \min \quad (4.54)$$

Ziel der Approximation ist es, den quadratische Gesamtfehler für einen vorgegebenen Knotenvektor $T = (t_1, t_2, \dots, t_{n+k})$ zu minimieren. Aus der Ableitung nach den *de Boor*-Punkten a_i folgt die Minimalbedingung

$$\sum_{j=1}^N y_j B_{m,k}(x_j) = \sum_{i=1}^n a_i \sum_{j=1}^N B_{i,k}(x_j) B_{m,k}(x_j) \quad m = 1(1)n \quad N \leq n \quad (4.55)$$

mit n linearen Gleichungen. Aus der Lösung dieses *Gaußschen* Normalgleichungssystems erhält man die gesuchten *de Boor*-Punkte a_i .

Für die Lösung von Gl. 4.55 spielt die Parametrisierung, d.h. die Parameteranzahl und die Parameterwerte des Knotenvektors, eine entscheidende Rolle. Außerdem muß für die Lösbarkeit des Gleichungssystems nach Gl. 4.55 berücksichtigt werden, daß die zu approximierenden Punkte möglichst gleichmäßig in den einzelnen Teilintervallen des Knotenvektors verteilt sind, da es sonst zu Lücken im Gleichungssystem kommen kann, und dieses nicht mehr eindeutig lösbar ist.

Für die hier betrachtete Problematik der Merkmalsgewinnung durch Splineapproximation wird zunächst der Parameterbereich äquidistant in p Teilintervalle aufgeteilt und dann die der Position des direkten Reflexes nächstliegende Intervallgrenze in die Position des direkten Reflexes verschoben. Zudem gilt, daß der Knotenvektor für die Merkmalsberechnung aller zu betrachtenden Observationen identisch sein muß, da sonst die Merkmale keine gemeinsame Berechnungsgrundlage haben.

Betrachtet man die Fehlervektoren D_i an den Knotenstellen, zeigt sich, daß diese nicht orthogonal zur Approximationskurve sein können und damit nicht immer die kürzesten Abstände zwischen Approximationskurve und den Punkten (y_j, x_j) darstellen [24]. Eine Verbesserung der Minimierung läßt sich erreichen, indem nicht der Fehler nach Gl. 4.54, sondern der kürzeste Abstand zwischen der Approximationskurve und den Meßpunkten minimiert wird. Dies führt aber auf ein nichtlineares Optimierungsproblem. Eine andere Möglichkeit ist die iterative Änderung der Parameterwerte t_i , bis die Fehlervektoren senkrecht zur Approximationskurve stehen. Hierzu werden in [42] mehrere Verfahren zur Bestimmung des Korrekturwertes Δt_i vorgestellt. Nachteilig für die Merkmalsberechnung ist, daß durch die Korrektur der t_i der Knotenvektor für jede Observation anders ausfallen kann und damit die oben genannte Bedingung nach einer einheitlichen Berechnungsgrundlage verletzt ist. Es soll daher auf diese Möglichkeit einer Verbesserung der Approximation verzichtet werden.

Die Approximation einer räumlichen BRDF ist mit Hilfe von zweidimensionalen Tensor-Produkt-Splines möglich. Eine entsprechende Splineapproximation läßt sich sowohl für ein kartesisches Koordinatensystem als auch für das Kugelkoordinatensystem der BRDF definieren. Die Grundidee ist dabei, die Splineapproximationen für die beiden unabhängigen Koordinatenachsen nacheinander auszuführen. Das Approximationsergebnis wird dabei nicht durch die Reihenfolge der Approximationen beeinflusst [57].

Kapitel 5

Entwicklung zweier winkelauflösender Streulichtsensoren

Die Entwicklung von Streulichtsensoren stellt einen wesentlichen Schwerpunkt der Arbeit dar. Anliegen der nachfolgenden Abschnitte ist es, die im Rahmen der Arbeit realisierten Sensoren hinsichtlich ihrer zugrundeliegenden Anforderungen und ihres Aufbaus zu beschreiben. Zudem werden für beide Sensoren Sensormodelle aufgestellt und Kalibrierverfahren vorgeschlagen, die eine absolute radiometrische Messung von Streuintensitäten ermöglichen.

5.1 Anforderungen und Konzeption

Um ein möglichst breites Spektrum an Oberflächenprüfaufgaben mit den realisierten Streulichtsensoren lösen zu können, galt es, bei deren Entwicklung den folgenden Anforderungen zu genügen:

- Für einen in-situ Einsatz sollten die Sensoren in ihren Abmaßen möglichst klein sein und wartungsfrei arbeiten. Der Einsatz von mechanisch bewegten Komponenten ist zu vermeiden.
- Eine Adaption an das Prüfproblem soll durch die Möglichkeit der Variation der Anordnung von Detektor und Beleuchtungsquelle möglich sein. Z.B. für eine Auswertung im Sinne der *Rayleigh-Rice* Theorie erfolgt die Messung häufig im Bereich um den direkten Reflex, dagegen ist für die Detektion von Partikeln eine Messung außerhalb des direkten Reflexes sinnvoll.
- Der Aufbau der Beleuchtungsquelle ist so zu wählen, daß der Durchmesser des Beleuchtungsflecks auf der zu prüfenden Oberfläche im Bereich von wenigen μm bis mm eingestellt werden kann und die einfallende Strahlungsleistung im Bereich von μW bis mW einstellbar ist. Für den Vergleich mit Streulichttheorien muß u.U. eine lineare Polarisierung mit bekannter Orientierung und eine ausreichende Kohärenzlänge realisierbar sein.
- Zur Gewährleistung der on-line Fähigkeit der Meßsysteme müssen Meßzeit und Meßauflösung an das Prüfproblem angepasst werden können. Bei dem faseroptischen Streu-

lichtsensor geschieht dieses durch eine Variierung der verwendeten Belichtungszeitstufen, d.h. viele Stufen erlauben eine hohe Signalaufösung bei langer Meßzeit und vice versa. Beim planaren Streulichtsensor kann durch eine Verringerung der Anzahl der verwendeten Einzeldetektoren die Meßzeit auf Kosten der örtlichen Meßaufösung verringert werden.

- Die Sensoren müssen absolut-messend arbeiten und eine radiometrische Erfassung der Streulichtverteilung über mehrere Dekaden Strahlungsintensität zulassen. Mit dieser Forderung ist eine Anwendung von Streulichttheorien und ein Vergleich zu anderen Meßgeräten gegeben.
- Die Streulichtsensoren sind für einen Lichtwellenlängenbereich von 400nm bis 1000nm zu konzipieren. In diesem Wellenlängenbereich stehen besonders kompakte Beleuchtungsquellen (z.B. Halbleiterlaser, diodengepumpte Festkörperlaser) und Detektoren auf Silizium-Basis zur Verfügung. Als Photodetektoren kommen für den faseroptischen Streulichtsensor Photo-MOS Strukturen (in Form einer CCD - charge coupled device) und für den planaren Streulichtsensor P-N Photodioden Strukturen zur Anwendung.

Die folgenden Abschnitte beschreiben den Aufbau der Streulichtsensoren, ihre Funktionsweise und die zugehörigen Sensormodelle. Zuvor sollen die beiden Sensoren zugrundeliegenden physikalischen Detektoreigenschaften diskutiert werden.

5.2 Allgemeine Detektoreigenschaften

Die zur Intensitätsmessung der Streustrahlung verwendeten Detektoren basieren auf dem „inneren photoelektrischen Effekt“, welcher besagt, daß durch die Bestrahlung eines Halbleiters mit Lichtquanten die im Halbleiter gebundenen Ladungsträger aus dem Kristall gelöst und damit zu freien Ladungsträgern werden, s. [11, 30].

Ausgangspunkt für eine radiometrische Beschreibung des Detektorverhaltens ist die Energie eines Photons, welche sich ergibt durch

$$E_p = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad [J], \quad (5.1)$$

wobei λ die Wellenlänge der Strahlung, h das *Plancksche* Wirkungsquantum, ν die Frequenz des Photons und c die Lichtgeschwindigkeit sind. Somit ist die Anzahl der Photonen pro Zeiteinheit für eine einfallende Strahlungsleistung Φ gegeben mit

$$n_p = \Phi \frac{\lambda}{hc} \quad [s^{-1}]. \quad (5.2)$$

Die Anzahl der durch die einfallenden Photonen erzeugten Ladungsträger im Detektor wird durch die Quantenausbeute η bestimmt. Die Quantenausbeute ist von einer Reihe von Faktoren wie der Wellenlänge der einfallenden Strahlung, der Zusammensetzung des Halbleitermaterials und den technologischen Herstellungsparametern des Detektors abhängig. Unter Annahme einer monochromatischen Strahlung erhält man die Anzahl von Photoelektronen pro Zeiteinheit durch

$$n_e = \eta n_p = \eta \Phi \frac{\lambda}{hc} \quad [s^{-1}]. \quad (5.3)$$

Der hieraus resultierende Photostrom bzw. die resultierende Photospannung und deren Digitalisierung hängen von der konkreten Realisierung des Detektors ab und werden daher in den Abschnitten zur Sensormodellierung für die beiden Sensoren getrennt behandelt.

Die Genauigkeit der Streulichtmessung wird durch die auftretenden Rauschprozesse begrenzt. An dieser Stelle sollen die wesentlichen Rauschanteile beider Sensoren aufgezeigt werden. Es sind folgende Rauschquellen auszumachen:

- **Schrotrauschen** infolge des zufälligen Auftretens einer Reihe von unabhängigen Ereignissen. Zu betrachten sind hierbei das **Quantenrauschen** der einfallenden Strahlung und das Schrotrauschen infolge eines Gleichstromflusses über einen P-N Übergang in Sperrrichtung. Das Schrotrauschen wird in Verbindung mit Photodetektoren häufig als **Dunkelstromrauschen** bezeichnet.
- Thermisches Rauschen von Wirkwiderständen; wird oft auch als **Johnson-Rauschen** bezeichnet.
- **Intensitätsrauschen** der Lichtquelle.
- **Verstärkerrauschen** der on-chip und off-chip Signalverstärker.
- **Quantisierungsrauschen** infolge der Analog zu Digital Wandlung des Meßsignals.
- Spezifische Rauschquellen einer Mehrdetektoranordnung:
 - **Festmusterrauschen** (FPN - fixed pattern noise) infolge von Schwankungen der Eigenschaften von Einzeldetektor zu Einzeldetektor, im allgemeinen wird dabei in Dunkelsignalschwankung (DSNU - dark signal non uniformity) und Schwankung des Hellsignals (PRNU - photo response non uniformity) unterschieden.
 - **Ausleserauschen**, z.B. 1/f Rauschen, Resetrauschen.

Für die Zusammenfassung aller Rauschterme zu einem Gesamtrauschen ist eine Konvertierung der einzelnen Rauschgrößen in eine einheitliche rauschäquivalente Größe anhand des jeweiligen physikalischen Übertragungsmodells notwendig. Für den hier betrachteten Fall einer radiometrischen Messung von Lichtintensitäten bietet sich eine Konvertierung der jeweiligen Rauschkenngröße in deren rauschäquivalenten Photonenfluß bzw. Strahlungsleistung¹ an. Unter der Annahme von unkorrelierten Rauschquellen ergibt sich das Gesamtrauschen n_g des Systems als die Wurzel aus der Quadratsumme der einzelnen Rauschterme. Somit kann das Signal zu Rausch Verhältnis (SNR signal to noise ratio) des Systems unter Verwendung des Gesamtrauschens bestimmt werden.

$$SNR = \frac{n_p}{n_g} \quad (5.4)$$

Für den Fall der Bestrahlung eines idealen Detektors mit einer konstanten Lichtintensität bleibt das **Quantenrauschen** n_q als begrenzende Rauschquelle übrig. Das Quantenrauschen kann als Summe der folgenden zwei statistischen Phänomene betrachtet werden: Die einfallende Strahlung besteht aus Photonen, deren Anzahl pro Zeit und Fläche statistischen

¹Unter Verwendung der Photonenenergie nach Gl. 5.1 kann der rauschäquivalente Photonenfluß in eine rauschäquivalente Strahlungsleistung umgerechnet werden.

Schwankungen unterliegt; die Konvertierung der Photonen in kinetische Energie von Elektronen stellt einen Prozeß mit beschränkter Wahrscheinlichkeit dar [16]. Da das Quantenrauschen auf diskreten Einzelereignissen basiert, wird es als *Poisson* verteilt angenommen [33], woraus folgt, daß die Varianz des Signals gleich dem Mittelwert des Signals ist. Betrachtet man nun das Verhältnis von Signalmittelwert n_p zu Standardabweichung $\sqrt{n_p}$ als Signal zu Rausch Verhältnis

$$SNR = \frac{n_p}{\sqrt{n_p}} = \sqrt{n_p}, \quad (5.5)$$

zeigt sich, daß mit steigendem Signalmittelwert das Signal zu Rausch Verhältnis ansteigt, woraus wiederum folgt, daß die physikalische Begrenzung der Meßgenauigkeit infolge des Quantenrauschens nur für kleine Strahlungsleistungen wirksam wird.

Eine weitere Art des Schrotrauschens stellt das **Dunkelstromrauschen** dar, welches durch die Fluktuation des Stromflusses im Halbleiter ohne einfallende Bestrahlung gegeben ist und den gleichen statistischen Eigenschaften wie das Quantenrauschen unterliegt. Eine Verringerung des Dunkelstromrauschens ist somit durch eine Verringerung des Dunkelstromes möglich. Der Dunkelstrom wird im wesentlichen durch die thermische Generierung von Ladungsträgern im Halbleiter bestimmt und hängt damit von der Temperatur des Halbleiters ab. Die Anzahl der Dunkelstromelektronen n_d ergibt sich mit

$$n_d = \frac{J_D A_D \Delta t}{q} \quad J_D \approx k e^{-\frac{E_G}{\alpha_G k T}}, \quad (5.6)$$

wobei J_D die Dunkelstromdichte, A_D die Detektorfläche, q die Elementarladung und α_G, E_G detektorspezifische Parameter sind. Durch eine Kühlung des Detektors läßt sich der Dunkelstrom und damit das Dunkelstromrauschen $\sqrt{n_d}$ so weit reduzieren², daß es in Bezug auf die anderen Rauschterme vernachlässigt werden kann.

Infolge der Diskretisierung des analogen Sensorausgangssignals mit einem Analog zu Digital Wandler (ADC - analog to digital converter) entsteht ein Quantisierungsfehler, welcher als **Quantisierungsrauschen** bezeichnet wird. Der Spitzenwert des Quantisierungsrauschens ergibt sich aus den von dem A/D Wandler erfaßten Spannungsbereich ΔU und der Anzahl der Digitalisierungsstufen³ N_{adc} , in die dieser Bereich unterteilt wird. Entsprechend berechnet sich der Effektivwert U_q aus der Dreieckswellenform des Quantisierungsfehlers \hat{U}_q mit

$$U_q = \hat{U}_q \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad \hat{U}_q = \frac{\Delta U}{N_{adc}} \quad SNR_{ADC} = \frac{\Delta U}{U_q}. \quad (5.7)$$

In der Praxis wird von den Herstellern von A/D Wandlern häufig ein Signal zu Rausch Verhältnis angegeben, welches neben dem Quantisierungsrauschen noch zusätzliche Einflüsse, wie beispielsweise die Kennlinienverzerrung berücksichtigt [86]. Die Auflösung der A/D Wandler wurde bei der Auslegung der Streulichtsensoren so gewählt, daß das Quantisierungsrauschen nicht den begrenzenden Rauschanteil darstellt.

²Als Faustformel kann angenommen werden, daß eine Temperaturverringerng um 8K eine Halbierung des Dunkelstromes bewirkt [41].

³Im allgemeinen entspricht die Anzahl der Digitalisierungsstufen einer Zweierpotenz $N_{adc} = 2^n$.

5.3 Faseroptischer Streulichtsensor

5.3.1 Aufbau

Der faseroptische Streulichtsensor besteht im wesentlichen aus folgenden Komponenten: Beleuchtungsquelle, faseroptische Vorsatzoptik, Koppeloptik und CCD Kamera. In Abbildung 5.1 ist der Aufbau des faseroptischen Streulichtsenors dargestellt.

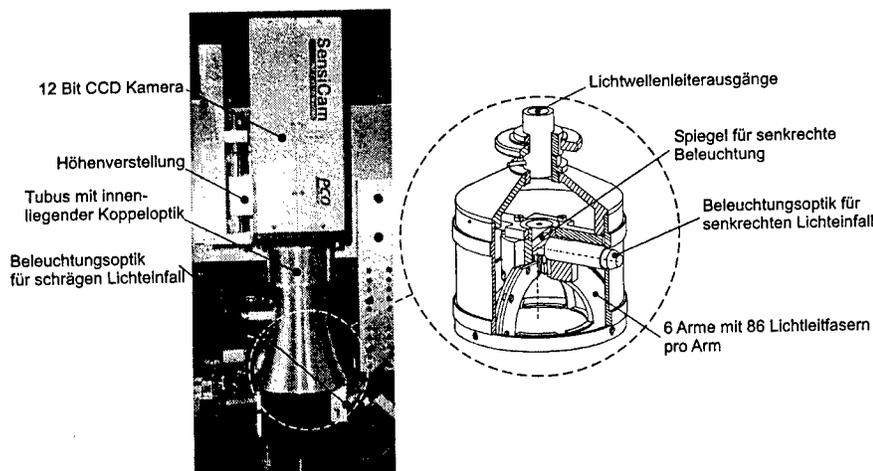


Abbildung 5.1: Aufbau des faseroptischen Streulichtsenors.

Als **Beleuchtungsquelle** für den Streulichtsensor kommen fasergekoppelte Halbleiterlaserdioden zur Anwendung. Diese zeichnen sich durch einen kompakten Aufbau und gute Strahlungsstabilität aus. Ein weiterer Vorteil von Halbleiterlaserdioden besteht in der Möglichkeit der elektronischen Regelung der Ausgangsleistung. Für den Transport des Lichtes von der Laserdiode zur Beleuchtungsoptik des Streulichtsenors werden *singlemode* Lichtleitfasern und polarisationserhaltende Fasern verwendet. Durch den Einsatz von polarisationserhaltenden Fasern und einer entsprechenden Schrägeinkopplung in die Faser kann der Polarisationszustand der Laserdiode bis zum Lichtleiterausgang beibehalten werden. Für eine Verbesserung des Polarisationsgrades der Beleuchtungsquelle kann zusätzlich ein Polarisationsfilter in die Beleuchtungsoptik des Streulichtsenors integriert werden. Durch Variation der verwendeten Mikrofokuslinsen und Blenden in der Beleuchtungsoptik können unterschiedliche Beleuchtungsfleckdurchmesser auf der Probe realisiert werden. Für die elektronische Regelung der Photodiodenleistung wird eine Laserdiodenstromquelle verwendet, welche die Betriebsarten konstanter Diodenstrom und konstante abgestrahlte Laserleistung ermöglicht. Die verwendeten Laserdioden und Objektive sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt. Alle verwendeten Beleuchtungsmodule haben die gleichen mechanischen Anschlußmaße, so daß sie für beide Sensoren eingesetzt und beim Experimentieren leicht ausgetauscht werden können.

Tabelle 5.1: Übersicht über die verwendeten Beleuchtungsquellen.

Laserdioden, Wellenlänge und optische Ausgangsleistung	$\lambda=670\text{nm}$, $\Phi_{opt} = 10\text{mW}$ $\lambda=681\text{nm}$, $\Phi_{opt} = 10\text{mW}$ $\lambda=810\text{nm}$, $\Phi_{opt} = 50\text{mW}$
Brennweiten der Beleuchtungsoptik f'	50mm, 88mm, 150mm
Beleuchtungsfleckdurchmesser	$8\mu\text{m}$ (fokussiert) ... 3.6mm (kollimiert)
Stabilität der Lasersteuerungen	<i>LDD200</i> : 50ppm <i>SK9716</i> : 100ppm

Um eine Abtastung der Hemisphäre in polarer Richtung über nahezu den gesamten Halbraum zu realisieren, wird eine **faseroptische Vorsatzoptik** nach einem Patent von *Rothe und Riedel* [76] verwendet (s. auch Kap. 2.2). Der faseroptische Sensorkopf kann als eine Vorsatzoptik mit einem Aperturwinkel von nahezu 90° betrachtet werden. Auf die verschiedenen Möglichkeiten zur Realisierung von Vorsatzoptiken wurde bereits in Kapitel 2 eingegangen. Bei der vorliegenden Vorsatzoptik handelt es sich um eine geordnete Anordnung von multimode Quarzglasfasern mit einem Außendurchmesser von $70\mu\text{m}$, einem Innendurchmesser von $50\mu\text{m}$ und einer numerischen Apertur von 0.22. Das der Probenoberfläche zugewandte Ende der Lichtwellenleiter soll im folgenden als Lichtwellenleitereingang und das kameraseitige Ende als Lichtwellenleiterausgang bezeichnet werden. Jeweils 85 Lichtwellenleitereingänge sind auf einem Sensorarm radial angeordnet. Die Lichtwellenleiterausgänge werden an der Oberseite des Streulichtensors zu einem Faserblock zusammengefaßt. Um eine geometrische Zuordnung der Positionen der Lichtwellenleiterausgänge zu den Winkelpositionen der zugehörigen Lichtwellenleitereingänge zu ermöglichen, werden die Fasern eines Armes nach deren Winkelpositionen geordnet und zu einem strichförmigen Faserbündel am Sensorausgang zusammengefaßt. Die Lichtleitfasern eines Sensorarms sind in einem Höhenwinkelbereich von 3° bis 88° in einem Abstand von einem Grad angeordnet. Der Sensorkopf kann bis zu sechs Sensorarme aufnehmen und erlaubt somit eine Abtastung der Hemisphäre in einem azimutalen Winkelabstand von 60° . Infolge der Verwendung von multimode Lichtleitern geht der am Wellenleitereingang vorhandene Polarisationszustand verloren und kann somit am Wellenleiterausgang nicht mehr analysiert werden. Dieser Nachteil könnte durch die Verwendung von polarisationserhaltenden Fasern aufgehoben werden. Allerdings dürfte eine Realisierung einer solchen Faseranordnung außerordentlich schwierig sein, da neben der Position der Faser auch deren Verdrehung bei der Fertigung der Sensorarme beachtet werden müßte.

Aufgabe der **Koppeloptik** ist es, die Lichtwellenleiterausgänge auf dem Kameradetektor abzubilden. Auf die Anforderungen an eine solche Koppeloptik und die im Rahmen der Arbeit entwickelte Optik wird im folgenden Abschnitt eingegangen.

Als **Strahlungsdetektor** kommt eine gekühlte CCD-Digitalkamera mit einer Intensitätsauflösung von 12 Bit und einem einstellbaren Integrationsbereich von 1ms bis 1000s zur Anwendung. Die Kamera verfügt über eine lichtwellenleitergekoppelte Digitalschnittstelle zum Auswerterechner. Neben der Übertragung der Bilddaten erlaubt die Kameraschnittstelle das Einlesen eines Microcodeprogrammes in die Kamera. Mit Hilfe dieses speziellen Microcodes kann die Ausleselogik des CCD-Chips programmiert werden, um beispielsweise nur Teilbereiche des Sensors auszulesen, Pixelladungen auf dem CCD-Chip zu akkumulieren (sog. Binning) oder eine Mehrfachbelichtung zu ermöglichen.

5.3.2 Kopplung Wellenleiter-Detektor

Die Verbindung von Lichtleitfasern und Photodetektormatrix kann entweder über eine direkte Kopplung der Lichtwellenleiterausgänge an den Photodetektor oder über eine Koppeloptik erfolgen. Bei der direkten Kopplung wird auf den Detektor ein Faserblock (sog. *Faceplates*), bestehend aus einzelnen Lichtleitfasern⁴ geklebt. Auf der dem Detektor gegenüberliegenden Seite des Faserblockes kann dann eine direkte Verbindung mit einem weiteren Faserbündel oder eine Einkopplung des Lichtes über ein Linsensystem erfolgen. Nachteilig bei dieser Variante ist, daß bei einer Kühlung des Detektors nicht nur der Detektor selbst, sondern auch das anzukoppelnde Faserbündel luftdicht gekapselt werden muß, um Kondensation und Vereisung am Detektor zu verhindern.

Um das in Kap. 5.2 erläuterte Dunkelstromrauschen zu minimieren und ein möglichst hohes Signal zu Rausch Verhältnis realisieren zu können, kommt für den faseroptischen Streulichtsensor ein gekühlter CCD-Detektor zum Einsatz. Durch die Kühlung des CCD-Detektors in der Kamera auf -15°C kann auch bei langen Integrationszeiten ($\Delta t > 10\text{s}$) der Einfluß des Dunkelstromrauschens vernachlässigt werden. Die damit erforderliche Kapselung des Detektorchips verhindert den Einsatz einer direkten Faserkopplung. Somit muß die Lichtwellenleiterankopplung an den CCD-Detektor über eine Koppeloptik erfolgen.

Das wichtigste Kriterium der Koppeloptik ist die möglichst verlustarme Abbildung der Lichtwellenleiterausgänge des Sensorkopfes auf die CCD-Matrix der Kamera. Diese Forderung ist nur zu erfüllen, wenn die Aperturen der als einzelne Lichtquellen wirkenden Faserenden von der Koppeloptik vollständig übertragen werden. Aus dieser Forderung und den gerätetechnischen Randbedingungen ergeben sich folgende Anforderungen an die Koppeloptik:

- Möglichst vollständige Übertragung der Apertur der Lichtwellenleiter, die numerische Apertur der Lichtleitfasern beträgt $\text{NA}=0.22$.
- Realisierung eines Abbildungsmaßstabes von $\beta' = -0.8$; dieser ergibt sich aus der Größe des Objektfeldes (Lichtwellenleitermatrix) $8 \times 6 \text{ mm}^2$ ($r=5 \text{ mm}$) und der Größe des Bildfeldes (CCD-Matrix) $6.4 \times 4.8 \text{ mm}^2$ ($r=4 \text{ mm}$).
- Ein Kontrast von $> 80\%$ bei einer Linienpaarauflösung von minimal 10 Linien/mm , welcher eine gute Separierbarkeit der einzelnen Lichtwellenleiter im Kamerabild zuläßt.

Da ein solches Objektiv kommerziell nicht verfügbar war, wurde eine entsprechende Koppeloptik entworfen und realisiert [79]. Als Hilfsmittel für das Optikdesign diente das Programm „ZEMAX“. Ausgehend von einem symmetrischen Startdesign wurden verschiedene Systeme entworfen und optimiert, s. Tab. 5.2.

Aus den verschiedenen Designansätzen wurde das Fünf-Linsen-System als Startdesign für eine weitere Optimierung ausgewählt. Vorteil dieses Startdesign ist, daß es bereits nach den ersten Optimierungsläufen eine gute Leistungsfähigkeit aufweist und zudem ausschließlich aus sphärischen Flächen besteht, die aus fertigungstechnischer Sicht zu bevorzugen sind. Um die Leistungsfähigkeit des Objektivs auch bei Verwendung einer preiswerten und verfügbaren Glassorte zu erreichen, mußte das Design um eine weitere Linse erweitert werden. In Abb. 5.2 ist das endgültige Design des Objektivs, bestehend aus sechs sphärischen Linsen, zu sehen.

⁴Üblicherweise haben die einzelnen Lichtleitfasern eines Faceplates einen Durchmesser von ca. $5 \mu\text{m}$

Tabelle 5.2: Systemvergleich der simulierten Objektivs mit sieben, fünf und drei Linsen. Das Dreier-Design enthält zwei asphärische Flächen, die anderen Flächen sind alle sphärisch. EX=Sagittalschnitt, EY=Meridionalschnitt.

	Siebener		Fünfer		Dreier	
	EX	EY	EX	EY	EX	EY
Kontrast $K(f_k)$						
paraxialer Punkt	91%	91%	81%	81%	91%	91%
Randpunkt	89%	87%	73%	50%	85%	83%
Systemlänge	84.6 mm		85.3 mm		91.1 mm	
Brennweite	18.4 mm		21.5 mm		22.0 mm	
\varnothing Spot paraxial	7.1 μm		14.9 μm		18.2 μm	
Energieanteil im \varnothing 20 μm	100%		97%		98%	
\varnothing Spot Rand	27.6 μm		101.0 μm		29.8 μm	
Energieanteil im \varnothing 20 μm	98%		86%		95%	
max. Linsendurchmesser	25 mm		28.5 mm		19 mm	

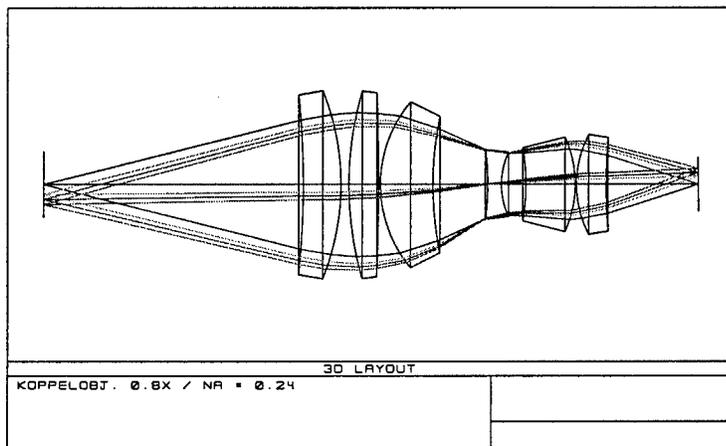


Abbildung 5.2: Darstellung der realisierten Koppeloptik

Mit der realisierten Koppeloptik konnten die gestellten Anforderungen sowohl in der Simulation als auch im Meßaufbau erfüllt werden. Beispielhaft für den Vergleich von Simulation und Messung ist in Abbildung 5.3 ein Parameter dargestellt, der in Abhängigkeit von der Ausdehnung eines Quadrates in der Bildebene die darin enthaltene Energie (sog. „Ensquared Energy“) eines abgebildeten Objektpunktes beschreibt. Diese Funktion stellt eine Variante der Beschreibung des Auflösungsvermögens der Optik dar, und hat gegenüber der sonst üblichen Darstellung durch die Modulations-Transfer-Funktion (MTF) den Vorteil, daß die Funktion als das Integral über ein Faserabbild in Abhängigkeit von der berücksichtigten Fläche betrachtet werden kann und somit ein einfacher Vergleich zwischen Simulation und

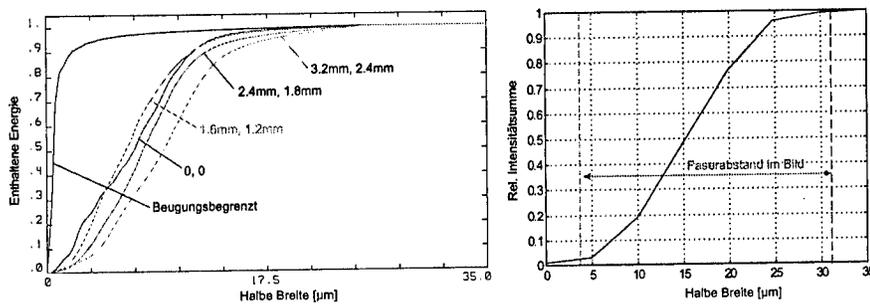


Abbildung 5.3: Vergleich des simulierten Auflösungsvermögens (links) des Objektivdesigns mit dem gemessenen Auflösungsvermögen (rechts) der gefertigten Koppeloptik anhand der „Ensquared Energy“. Die Kurven in der linken Abbildung repräsentieren die Simulation der „Ensquared Energy“ verschiedener Objektpunkte. Berücksichtigt man beim Vergleich den in der rechten Abbildung bereits enthaltenen halben Querschnitt der Faserabbildung von $20\mu\text{m}$, stimmen beide Verläufe gut überein.

Meßergebnis gegeben ist.

Die wesentlichen Parameter der gefertigten Optik sind:

- Brennweite des Systems $f' = 39.6$ mm.
- Objektseitige Apertur $NA=0.24$.
- Abbildungsmaßstab: -0.8 .
- In der Detektorebene konzentrieren sich 95% der Energie eines abgebildeten Wellenleiters innerhalb eines Kreises mit einem Radius von $25\mu\text{m}$. Dieser Radius entspricht einer 5×5 Pixelumgebung des CCD Detektors, d.h. für den am Ausgang der faseroptischen Vorsatzoptik vorhandenen minimalen Abstand der Lichtwellenleiter von ca. $70\mu\text{m}$ ist eine sehr gute Separierbarkeit der abgebildeten Lichtwellenleiterausgänge gegeben.
- Baulänge Objektiv: 50 mm, Abstand Objektebene-Bildebene=100 mm.
- Kameraseitiger Anschluß mit C-Mount für $1/2''$ CCD.
- Objektseitiger Anschluß an Lichtwellenleitermatrix über einen austauschbaren Adapter.

Durch die Variation der kameraseitigen und bildseitigen Adapterlängen können der Abildungsmaßstab und die übertragbare numerische Apertur an die jeweilige Lichtwellenleiter-Detektor Kombination angepaßt werden. Da das Koppelobjektiv für eine monochromatische Strahlungsquelle entwickelt wurde, ist bei Änderung der Wellenlänge der Bestrahlungsquelle zu beachten, daß sich auch bei kleinen Wellenlängenänderungen die bildseitige Fokusebene deutlich verschiebt und damit das Faserbild unscharf wird. Beispielsweise ergibt sich bei einer Änderung der Lichtwellenlänge von 670 nm auf 680 nm eine Verschiebung der bildseitigen Fokusebene um ca. $100\mu\text{m}$.

5.3.3 Radiometrisches Modell

Eine absolute radiometrische Messung der Streulichtverteilung ist nur möglich, wenn ein Modell für das Übertragungsverhalten des Sensorsystems existiert und dieses eine Umrechnung des gewonnenen digitalen Wertes in die ursprüngliche physikalische Größe zulässt. In Abbildung 5.4 ist die Signalkette für den faseroptischen Streulichtsensor mit dessen systematischen und stochastischen Einflußgrößen dargestellt. In Bezug auf die Berücksichtigung von

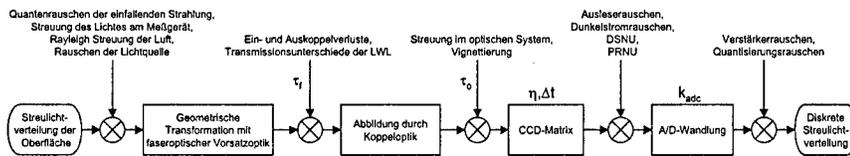


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung der Signalkette des faseroptischen Streulichtensors, der Einflußgrößen und charakteristischen Kenngrößen.

systematischen und stochastischen Einflußgrößen im radiometrischen Modell sollen folgende Annahmen gemacht werden:

- Die Ein- und Auskoppelverluste und die Transmissionsverluste innerhalb des Lichtwellenleiters stellen korrigierbare systematische Fehler dar, und werden als konstante Größe für eine bestimmte Faser und damit für einen bestimmten Raumwinkel betrachtet. D.h. es werden keine Einflüsse, wie die Abhängigkeit der Einkoppelverluste vom Einfallswinkel der Strahlung oder eine Abhängigkeit der Ein- und Auskoppelverluste von der Modenzusammensetzung der Strahlung berücksichtigt.
- Die Streuung im optischen System überlagert sich anderen stochastischen Signalanteilen und kann quantitativ nicht getrennt erfaßt werden. Eine Reduzierung der Streuung kann nur durch entsprechende konstruktive Maßnahmen (Blenden, diffuse Schwärzung, entspiegelte und superglatte Linsen) erreicht werden.
- Die Vignettierung an der Koppeloptik kann, analog zu den Koppelverlusten, als konstanter systematischer Fehler für die Abbildung eines Lichtwellenleiters betrachtet werden.
- Die systematischen Fehler von Einzeldetektor zu Einzeldetektor, das sog. Festmusteruschen bestehend aus DSNU und PRNU, sollen korrigiert werden.

Unter Verwendung von Gleichung 5.3 läßt sich die Anzahl der innerhalb der Integrationszeit Δt in einer CCD-Zelle akkumulierten Photoelektronen in Abhängigkeit von der einfallenden Bestrahlungsleistung mit

$$n_e = \eta_{\text{ccd}} \Phi \frac{\lambda}{hc} \Delta t \quad (5.8)$$

beschreiben. Die anschließende A/D Wandlung bewirkt eine Diskretisierung der Ladungsgröße der CCD-Zelle und wird in dem Sensormodell durch den ADC-Faktor k_{adc} ausgedrückt.

Der Analog zu Digital-Konvertierungsfaktor k_{adc} gibt an, wieviel Photoelektronen für die Erhöhung des Digitalwertes um ein LSB notwendig sind. Durch Umstellen erhält man nun den gewünschten Zusammenhang zwischen gemessenem Digitalwert g und der verursachenden Strahlungsleistung Φ .

$$\Phi = \frac{hc}{\underbrace{k_{adc} \eta_{ccd} \lambda}_{konst}} \frac{g}{\Delta t} \quad g = \{0, 1, 2, \dots, N_{adc} - 2, N_{adc} - 1\} \quad (5.9)$$

Berücksichtigt man nun die Tatsache, daß sich die Abbildung des Ausgangs eines Lichtwellenleiters über mehrere Pixel erstreckt, ergibt sich der Digitalwert g_s eines bestimmten Lichtwellenleiters, und damit der eines bestimmten Raumwinkels, als die Summation aller Pixel innerhalb des entsprechenden Faserbildes F_s .

$$g_s = \sum_{i \in F_s} prnu_i (g_i - dsnu_i) \quad (5.10)$$

In Gleichung 5.10 wird ferner die geforderte Korrektur des Festmustersrauschens (DSNU und PRNU) pixelweise berücksichtigt. Aus der Signalkette in Abbildung 5.4 und der Annahme, daß die Ein- bzw. Auskoppelverluste, die Transmissionsverluste und die Vignettierung für einen Lichtwellenleiter konstant sind, folgt, daß diese Verluste zu einem optischen Transmissionsfaktor $\tau_s = \tau_f \cdot \tau_o$ pro Lichtwellenleiter zusammengefaßt werden können. Geht man nun ferner davon aus, daß der PRNU-Faktor und der Transmissionsfaktor für den zusammengebauten Sensorkopf nicht getrennt bestimmt werden können, ist eine Zusammenfassung von PRNU- und Transmissionsfaktor zu einem Korrekturfaktor k_s pro Lichtwellenleiter sinnvoll.

$$g_s = k_s \left(\sum_{i \in F_s} g_i - dsnu_s \right) \quad k_s = \frac{1}{\tau_s \overline{prnu}_s} \quad dsnu_s = \sum_{i \in F_s} dsnu_i \quad (5.11)$$

Da die PRNU im vorliegenden Aufbau nicht für die einzelnen Pixel, sondern nur für die gesamte Pixelumgebung eines Lichtwellenleiters ermittelt werden kann, werden entsprechend Gleichung 5.11 zur Korrektur eine über die Pixel summierte DSNU und eine gemittelte PRNU verwendet. Unter Einbeziehung der genannten Korrekturfaktoren ergibt sich das radiometrische Gesamtmodell des faseroptischen Sensors nach Gl. 5.12.

$$\Phi_s = \frac{hc}{k_{adc} \eta_{ccd} \lambda} \cdot \frac{1}{\Delta t} \cdot k_s \left(\sum_{i \in F_s} g_i - dsnu_s \right) \quad (5.12)$$

Im Rahmen einer Kalibrierung müssen die unbekanntenen Korrekturfaktoren k_s und $dsnu_s$ für jede Lichtwellenleiterabbildung getrennt bestimmt werden. Je nach dem gewählten Zuordnungsverfahren (Faser eines Streuwinkels zu Pixelgruppe) kann die Anzahl der Pixel N_{F_s} für alle Streuwinkel gleich sein oder für jeden Streuwinkel unterschiedlich, s. Abschnitt. 5.3.5.

5.3.4 Modell der Winkel- und Ortsfrequenzauflösung

Eine Beschreibung der geometrischen Anordnung der Streulichtmeßstellen des faseroptischen Sensors auf der Hemisphäre kann durch eine Menge von diskreten Winkelpositionen erfolgen. Der realisierte Sensorkopf besteht aus bis zu sechs einzelnen Armen, wobei jedem Arm ein

fester Azimutwinkel ϕ_s zugeordnet ist. Durch die in jedem Arm radial angeordneten Lichtwellenleiter wird die Auflösung und Position der Streuwinkel (Polarwinkel) θ_s bestimmt. Mit der verwendeten Lichtwellenleiteranordnung ergeben sich folgende Winkelpositionen für die Lichtwellenleitereingänge:

$$\theta_s = \{3^\circ, 4^\circ, \dots, 87^\circ, 88^\circ\}; \quad \phi_s = \{0^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 300^\circ\}. \quad (5.13)$$

Aus der konstanten Eintrittsapertur der Lichtwellenleiter folgt ein konstanter Raumwinkel Ω_s für alle erfaßten Positionen auf der Hemisphäre. Die Größe des Raumwinkels kann unter Verwendung der Querschnittsfläche A_s der verwendeten Lichtleitfaser und des Abstandes R_s zwischen Lichtleitereingang und Ursprung des BRDF-Koordinatensystems (s. Abbildung 4.3) approximiert werden.

$$\Omega_s \approx \frac{A_s}{R_s} \Omega_0 = \frac{\pi(0.025 \text{ mm})^2}{(15 \text{ mm})^2} = 8.7 \cdot 10^{-6} \text{ sr} \quad (5.14)$$

Unter der Annahme der Gültigkeit der Beugungs-Gittergleichung können die von dem faseroptischen Sensor abgetasteten Ortsfrequenzen der Oberfläche mit Hilfe der zweidimensionalen Gittergleichung 4.29 gewonnen werden. Setzt man die äquidistante Winkelabstützung des Sensorkopfes in die Gittergleichung 4.29 ein, erhält man eine nichtäquidistante Auflösung der Ortsfrequenzen, siehe Tabelle 5.3.

5.3.5 Kalibrierung

Für die Bestimmung der Korrekturparameter k_s und $dsnu_s$ der radiometrischen Übertragungsfunktion nach Gl. 5.12 ist eine mehrstufige Kalibrierung des faseroptischen Streulichtsenors erforderlich. Als erstes müssen die Positionen $p \in F_s$ aller von der Abbildung eines Lichtwellenleiters auf der Detektormatrix betroffenen Pixel ermittelt werden. Voraussetzung für eine Detektion aller Lichtleitfasern ist, daß die Fasereingänge möglichst homogen beleuchtet werden. Eine ausreichend gute Ausleuchtung kann durch die Beleuchtung einer *Lambertschen* Oberfläche oder die Verwendung einer volumenstreuenden Kugel erreicht werden. Für die Detektion der Faserpixel im Bild wird der folgende Bildverarbeitungsalgorithmus vorgeschlagen.

Zunächst wird die zweidimensionale Kreuzkorrelation zwischen dem Kamerabild und einem Strukturelement berechnet. Hierbei sollte das Strukturelement so gewählt werden, daß es möglichst gut einer idealen Faserabbildung entspricht. Geht man dabei von einem typischerweise *gaußförmigen* Laserstrahlprofil im Ortsbereich des Abbildungssystems aus und faltet dieses mit der ebenfalls als *gaußförmig* anzunehmenden Punktverbreiterungsfunktion der Abbildungsoptik, erhält man für das resultierende Faserabbild wiederum einen *gaußförmigen* Verlauf. Schlußfolgernd wird als Strukturelement S eine diskretisierte zweidimensionale *Gaußglocke* verwendet. Um ein möglichst einheitliches Korrelationsergebnis $K(x, y)$ auch bei unterschiedlich stark beleuchteten Fasern zu erhalten, wird die Kreuzkorrelation mit der innerhalb des Strukturelementes befindlichen Signalenergie normiert. Hierfür wird das ursprüngliche Kamerabild $B(x, y)$ mit einem zweiten binären Strukturelement S_B gefaltet. Dieses Strukturelement entspricht einer Binarisierung des für die Kreuzkorrelation verwendeten Strukturelements S und realisiert somit eine ungewichtete Summation der Signalenergie innerhalb des Strukturelementes. Die Koeffizienten beider Strukturelemente werden so

normiert, daß die Summe über deren Elemente Eins ergibt.

$$K(x, y) = \frac{1}{B(x, y) * S_B} \cdot B(x, y) * S \quad (5.15)$$

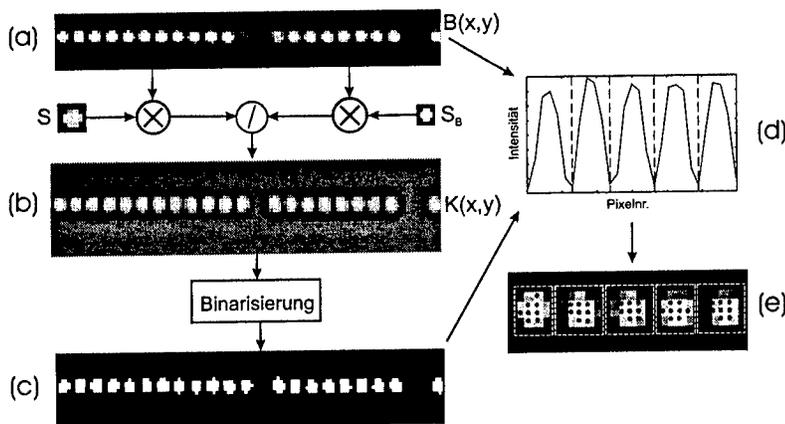


Abbildung 5.5: Darstellung der Bildverarbeitungsschritte zur Detektion der Lichtwellenleiterpixel für einen Bildausschnitt: (a) Kamerabild, (b) gefiltertes Bild nach Anwendung des Strukturfilters, (c) binarisiertes Bild, (d) ermittelte Fasergeraden im Grauwertprofil, (e) resultierende Faserumgebungen mit jeweils acht Faserpixeln.

In Bild (b) der Abbildung 5.5 ist die Wirkung dieses Strukturfilters zu sehen. Hierbei ist die homogene Hervorhebung der Lichtleitfasern unabhängig von deren austretender Lichtintensität zu beachten. Dementsprechend kann ein globaler Schwellwert für die anschließende Binarisierung des normierten Korrelationsresultates verwendet werden. Mit Hilfe des binarisierten Bildes werden im ursprünglichen Kameragrauwertbild die Grenzen zwischen benachbarten Faserabbildungen gesucht und es wird ein rechteckiger Auswertebereich für jede Faserabbildung festgelegt. Im letzten Schritt werden innerhalb des ermittelten Auswertebereichs einer Lichtwellenleiterabbildung jene Pixel gesucht, die eine höhere Intensität als ein vorgegebener Schwellwert⁵ aufweisen. Für jeden Lichtwellenleiter werden dann die Positionen der gefundenen Pixel abgespeichert. Hierbei können entweder alle gefundenen Pixel oder nur eine vorgegebene Anzahl von Pixeln berücksichtigt werden. In Abbildung 5.5 sind die einzelnen Schritte des Pixelzuordnungsalgorithmus veranschaulicht.

Im nächsten Kalibrierschritt wird der Korrekturfaktor $dsnu_s$ entsprechend dem Dunkelanteil der Streulichtmeßpunkte bestimmt. Hierfür wird der Sensor vollständig abgedunkelt und ein über mehrere Aufnahmen gemittelttes Dunkelsignalbild aufgenommen. Die Summierung über die Lichtwellenleiterpixel führt dann auf den gesuchten Dunkelanteil $dsnu_s$ eines Streulichtmeßpunktes. Im letzten Kalibrierschritt wird der Korrekturfaktor k_s bestimmt. Der Korrekturfaktor k_s verkörpert neben den relativen Variationen der PRNU von

⁵Der Schwellwert sollte deutlich über dem Dunkelsignal liegen.

Streulichtmeßpunkt zu Streulichtmeßpunkt auch die Anbindung an die absolut zu messende Strahlungsleistung Φ_s über den unbekanntenen optischen Transmissionsfaktor τ_s . Daraus folgt, daß für diesen Kalibrierschritt die in den einzelnen Streulichtmeßstellen einfallende Strahlungsleistung absolut bekannt sein muß. Hierfür wird eine *Lambertsche* Oberfläche mit einem bekannten Reflexionskoeffizienten verwendet und die auf die Oberfläche einfallende Strahlungsleistung mit einem Photometer gemessen.

5.3.6 Theoretische Betrachtungen zu den Eigenschaften des faseroptischen Sensors

Anhand der vorgestellten Modelle und der Betrachtungen zur Kalibrierung des faseroptischen Sensors sollen dessen Eigenschaften bezüglich der absoluten Messung der BRDF bestimmt werden. In Tabelle 5.3 sind die für eine Abschätzung der Leistungsfähigkeit relevanten Parameter des faseroptischen Streulichtsensoren aufgeführt.

Mit dem faseroptischen Sensorkopf lassen sich zwei verschiedene Einfallswinkel für die Lichtquelle realisieren. Die aus den Einfallswinkeln und den Winkeln der Streulichtmeßstellen resultierenden Bandbreiten der vom Sensor erfaßten Oberflächenortsfrequenzen⁶ sind ebenfalls in Tabelle 5.3 aufgeführt. Hierbei ist zu beachten, daß die untere Bandbegrenzung nicht nur durch den kleinsten Winkel zwischen spekularem Reflex und Streuwinkel gegeben ist, sondern zusätzlich mit dem Durchmesser des Beleuchtungsflecks begrenzt wird. Aus den zwei unterschiedlichen Radien der Sensorköpfe resultieren unterschiedliche Raumwinkel der Streulichtmeßstellen (Lichtwellenleitereingänge), welche wiederum zu zwei unterschiedlichen Abtastbreiten der Ortsfrequenzen in einem Streulichtmeßpunkt führen.

Betrachtet man die Kameraräuscherterme Quantisierungsrauschen ($n_{adc} = k_{adc} \frac{1}{2\sqrt{3}}$), Ausleserauschen und Dunkelstromrauschen, läßt sich feststellen, daß aufgrund der starken Kühlung des Detektors auf -15°C der Anteil des Dunkelstromrauschens für einen Pixel vernachlässigt werden kann. Bei der Berechnung der Strahlungsleistung nach Gl. 5.12 ist zu beachten, daß die Rauschterme für die Pixel eines LWL-Bildes akkumuliert werden. Demzufolge führt eine Erhöhung der Anzahl der für die Auswertung berücksichtigten Pixel zu einer Vergrößerung des Meßrauschens. Folglich sollte die Anzahl der bei der Auswertung einer LWL-Abbildung berücksichtigten Pixel möglichst klein und für alle Lichtwellenleiter gleich sein. Bei Verwendung einer konstanten Anzahl von Pixeln für alle Lichtwellenleiter kann von einem einheitlichen Rauschverhalten der Streulichtmeßstellen ausgegangen werden. In Abbildung 5.6 ist das Signal zu Rausch Verhältnis in Abhängigkeit von der Anzahl der Pixel, über die eine konstante Ladungsmenge⁷ verteilt wird, dargestellt. Hierbei wird nicht berücksichtigt, daß mit einer größeren Pixelanzahl auch eine größere Ladungsmenge aufgenommen werden kann. Unter Verwendung des radiometrischen Übertragungsmodells nach Gl. 5.12 läßt sich das Kamerarauschen in eine rauschäquivalente Strahlungsleistung (NEP - noise equivalent power) umwandeln. Hierbei ist zu beachten, daß die aus der einfallenden Strahlungsleistung resultierenden Photoelektronen über mehrere Pixel verteilt sind und daher die für Einzeldetektoren spezifizierten Rauschangaben aus Tabelle 5.3 mit der

⁶Gilt nur unter der Annahme der Gültigkeit der Gittergleichung, s. *Rayleigh-Rice* Theorie in Kap. 4.3.

⁷Als Signalladungsmenge wird die Sättigungsladung eines Pixels angenommen.

Tabelle 5.3: Die Systemparameter des faseroptischen Streulichtensors, alle Angaben beziehen sich auf eine Integrationszeit von $\Delta t = 1ms$ und eine Lichtwellenlänge von $\lambda = 680nm$.

Sensorkopf	Radius 15mm	Radius 30mm
Polarer Winkelbereich θ_s	0°...360° (60°)	
Azimutaler Winkelbereich ϕ_s	3°...88° (1°)	
Einfallswinkel θ_i	0°, 40°	
Einzeldetektorfläche A_s	1.9 · 10 ⁻³ mm ²	
Ortsfrequenz f_x für $\theta_i = 0^\circ$	0.07 ... 1.47 μm^{-1}	
Ortsfrequenz f_x für $\theta_i = 40^\circ$ und $\phi_s = 0^\circ$	-0.86 ... 0.52 μm^{-1}	
Ortsfrequenz f_y für $\theta_s = 88^\circ$	-1.27 ... 1.27 μm^{-1}	
Beleuchtungsfleckdurchmesser	16 μm (fokussiert) ... 3.6mm (kollimiert)	
Raumwinkel Ω_s	8.7 · 10 ⁻⁶ sr	2.2 · 10 ⁻⁶ sr
Sichtbereich auf der Oberfläche FOV	> 6.7mm	> 13mm
Kamera		
Quantenwirkungsgrad η @ 630nm	20 %	
ADC Konstante k_{adc}	7.5 e/LSB	
Antiblooming Effizienz	1:1000	
Dunkelstromrauschen n_d	0.1 e/(Pixel · s)	
Sättigungsladung Q_{max}	35000 e	
Ausleserauschen n_a	14 e	
DSNU	1 LSB	
PRNU	0.2 %	
Integrationszeit	1ms ... 1000s	
Resultierende Systemparameter		
für $\tau_s = 0.5$, $N_{F_s} = 25$		
Sättigungsstrahlungsleistung eines Pixels	1 · 10 ⁻¹⁰ W	
Quantenrauschen der Sättigungsstrahlungsleistung	1.7 · 10 ⁻¹³ W	
NEP eines Pixels	4.1 · 10 ⁻¹⁴ W	
NEP eines Streulichtmeßpunktes	1 · 10 ⁻¹² W	
Quantenrauschen äquivalente Leistung für Quantenrauschen=Kamerarauschen eines Pixels	5.8 · 10 ⁻¹² W	

Pixelanzahl N_{F_s} multipliziert werden müssen.

$$NEP = \frac{n_g}{\Delta t} \cdot \frac{1}{k_s} \cdot \frac{hc}{\eta_{ccd}\lambda} \quad n_g = \sqrt{N_{F_s}^2 (n_a^2 + (n_d \Delta t)^2 + n_{adc}^2)} \quad (5.16)$$

Außerdem ist der in Gl. 5.12 enthaltene Korrekturfaktor $k_s = 1/\tau_s \cdot \overline{pr\overline{n}_s}$ zu berücksichtigen. Aus Gl. 5.16 ist zu erkennen, daß die Kamerarausquellen vom Meßsignal unabhängig sind und nur von der gewählten Integrationszeit und der Anzahl der berücksichtigten Pixel abhängen. Eine Verringerung der rauschäquivalenten Leistung ist demzufolge durch eine Erhöhung der Integrationszeit oder eine Verringerung der Pixelanzahl N_{F_s} möglich. Verringert man die Anzahl der Faserpixel für eine gegebene optische Konfiguration und der daraus resultierenden Größe der LWL-Abbildung, werden jedoch gleichzeitig weniger Signalladungen bei der Akkumulation des Streulichtsignals berücksichtigt. Einen Kompromiß zwischen

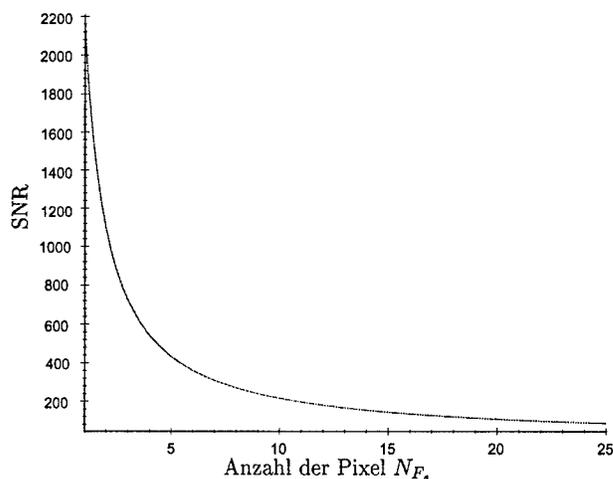


Abbildung 5.6: Signal zu Rausch Verhältnis für eine konstante Ladungsmenge in Abhängigkeit von der zur Repräsentation der Lichtwellenleiterabbildung verwendeten Pixelanzahl.

einem geringen Signalrauschen bei kleiner Pixelanzahl und der aus der Forderung nach möglichst vollständiger Akkumulation der Signalladung folgenden großen Pixelanzahl bietet die verwendete Kamera mit der Möglichkeit der on-chip Akkumulation der Signalladungen. Dieses sog. Binning erlaubt die Akkumulation der Ladungen benachbarter Pixel direkt auf dem CCD-Chip. Das anschließende Auslesen der Ladung aus dem Detektor erfolgt nur einmal für die auf dem Detektor akkumulierte Pixelnachbarschaft. Folglich reduziert sich der Anteil des Ausleserausens und des Quantisierungsrauschens am akkumulierten Gesamtsignal und das Signal zu Rausch Verhältnis steigt. Nachteile dieses Verfahrens sind die reduzierte örtliche Auflösung des Detektors und die Begrenzung der akkumulierbaren Gesamtladung durch die Sättigungsladung eines Einzelpixels.

In Tabelle 5.3 sind die entsprechenden NEP-Werte für die kleinste Integrationszeit des Detektors von 1ms aufgeführt. Von besonderem Interesse ist nun die Frage, wie groß das in Abschnitt 5.2 erläuterte Quantenrauschen n_q im Vergleich zum Kameraruschen ist, d.h., es wird diejenige Strahlungsleistung gesucht, deren Quantenrauschen dem Gesamtrauschen der Kamera entspricht.

$$n_q = \sqrt{n_p} = n_s \frac{1}{\eta \cdot k_s} \quad (5.17)$$

Aus der Quantenanzahl n_p des Signals kann nun die korrespondierende Signalstrahlungsleistung bestimmt werden, s. Tabelle 5.3. Das heißt für die Detektion von Strahlungsleistungen, die kleiner als dieser Werte sind, wird das SNR durch die Kameraruschprozesse begrenzt. In Abbildung 5.7 ist das aus Kameraruschen und Quantenrauschen resultierende Signal zu Rausch Verhältnis für einen Pixel und eine Integrationszeit von 1ms in Abhängigkeit von der einfallenden Strahlungsleistung dargestellt. Vergleicht man das Signal zu Rausch Verhältnis eines Pixels aus Abbildung 5.7 mit dem Signal zu Rausch Verhältnis einer Pixelgruppe aus

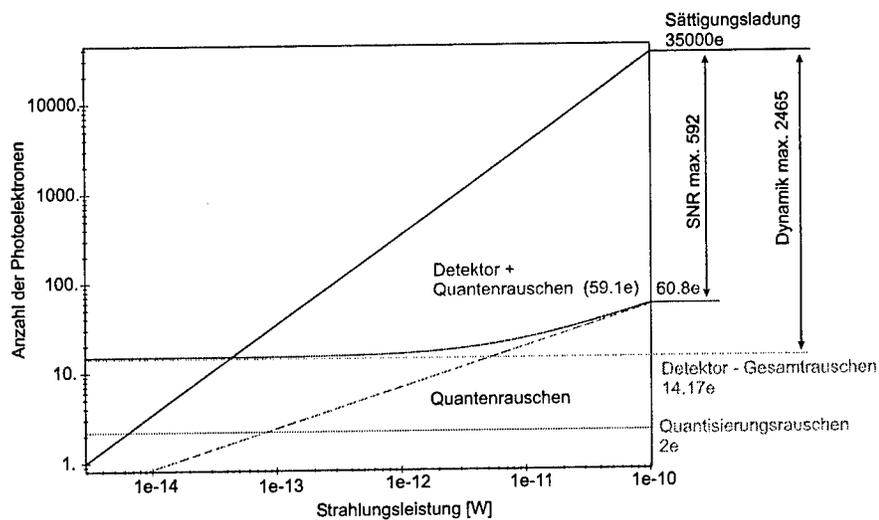


Abbildung 5.7: Signal zu Rausch Verhältnis unter Berücksichtigung des Kamera- und Quantenrauschens für einen Pixel, einer Integrationszeit von $\Delta t = 1\text{ms}$ und $\tau = 0.5, \eta = 0.2$ in Abhängigkeit von der einfallenden Strahlungsleistung.

Abbildung 5.6, kann bei Verwendung des SNRs der Sättigungsladung festgestellt werden, daß das SNR des faseroptischen Streulichtensors für Pixelgruppen mit mehr als vier Pixeln durch das Detektorrauschen begrenzt ist. Zudem ist bei Betrachtung von Gl. 5.17 festzustellen, daß für ein konstantes Ausleserauschen n_g und eine konstante Quantenausbeute η des Detektors das korrespondierende Quantenrauschen mit sinkendem Transmissionsfaktor (entspricht einer steigenden Signaldämpfung) linear ansteigt. Da die korrespondierende Signalleistung quadratisch mit dem Quantenrauschen steigt, ist in Bezug auf das Quantenrauschen mit sinkendem Transmissionsfaktor und steigendem Eingangssignal eine Steigerung des Signal zu Rausch Verhältnisses gegeben.

Bei der Verwendung von CCD-Sensoren ist zu beachten, daß bei einer Überschreitung der Sättigungsladung in einem CCD-Pixel die überschüssigen Ladungen in die Nachbarpixel überlaufen. Dieser Effekt wird als *Blooming* bezeichnet. Mit Hilfe von zusätzlichen Antibloomingstrukturen (sog. *antiblooming drains*) auf dem CCD-Chip kann das Überlaufen von Elektronen verringert werden. Die verwendete Kamera realisiert einen Antibloomingfaktor von 1000, d.h. bei bis zu tausendfacher Überbelichtung kann das Überlaufen von Ladungen in Nachbarpixel verhindert werden. Somit stellt der *Blooming* Effekt für den faseroptischen Streulichtsensor ein Limit für die maximal meßbare Signaldifferenz von zwei benachbarten Streulichtmeßstellen dar. Diese lokale Begrenzung der Signaldynamik muß besonders bei der Messung von Streulichtverteilungen mit einer ausgeprägten spekularen Komponente beachtet werden.

5.4 Planarer Streulichtsensor

5.4.1 Aufbau

Um eine möglichst vollständige Erfassung der Streuverteilung innerhalb eines Hemisphärenausschnittes zu ermöglichen, wurde im Rahmen der Arbeit ein planarer Streulichtsensor entwickelt und in den Meßaufbau integriert. Im Gegensatz zu dem faseroptischen Streulichtsensor wird bei dem planaren Streulichtsensor keine Vorsatzoptik verwendet, sondern ein Ausschnitt der Hemisphäre mit einer ebenen Photodiodenanordnung erfaßt. Die bei einer Streulichtmessung mit dem planaren Streulichtsensor erreichbare Winkelauflösung hängt somit direkt von der Einzeldetektoraufösung und dem Abstand Detektor zu Oberfläche ab. Eine schematische Darstellung der Konstruktion des Streulichtensors ist in Abb. 5.8 zu

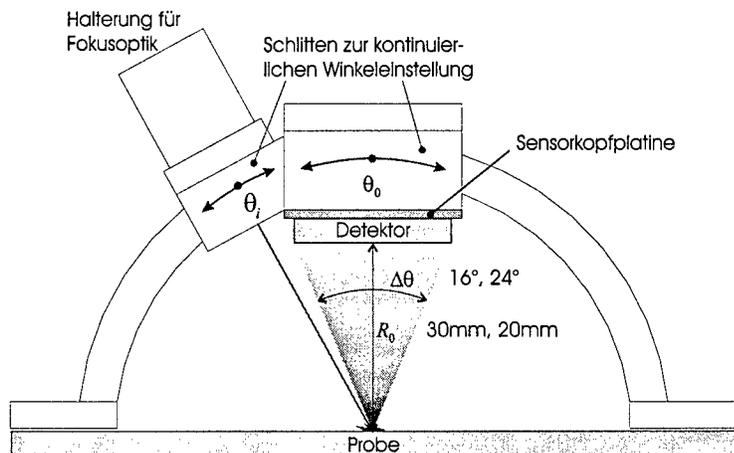


Abbildung 5.8: Schematische Darstellung des Sensors mit polarem Photodiodenarray.

sehen. Der Sensor und die Beleuchtungsoptik sind auf zwei separaten Schlitten angeordnet. Mit den sich auf einen Halbring bewegendenden Schlitten können der Einfallswinkel der Beleuchtung und der vom Sensor erfassbare Winkelbereich eingestellt werden. Durch die Verwendung entsprechender Abstandsscheiben zwischen Sensorkopfplatte und Sensorschlitten lassen sich verschiedene Abstände zwischen Oberfläche und Sensor einstellen, wodurch der überdeckte Winkelbereich und die Winkelauflösung variiert werden können. In Tabelle 5.4 sind die verwendeten Konfigurationen aufgeführt.

Der **Detektor** des planaren Streulichtensors [68] stellt eine ringförmige Anordnung von 8013 einzelnen Photodioden (s. Abb. 5.13) dar, deren sog. logarithmisch-polare Anordnung dem menschlichen Auge nachempfunden wurde, d.h. die Konzentration von Pixeln im Zentrum des Sensors (entsprechend der *Fovea* des menschlichen Auges) ist groß und nimmt in Richtung der peripheren Ringe (äquivalent zur *Retina* des menschlichen Auges) ab. Die photoaktive Fläche befindet sich innerhalb eines Kreises mit einem Radius von 4mm, auf der insgesamt 8013 Einzeldetektoren auf 76 Kreisen angeordnet sind. Eine weitere sehr

interessante Eigenschaft ist die ebenfalls dem menschlichen Auge nachempfundene logarithmische Empfindlichkeitskennlinie. Durch die logarithmische Wandlung der einfallenden Bestrahlungsstärke in ein Spannungssignal am Sensorausgang läßt sich ein Dynamikbereich von mehr als sechs Dekaden Bestrahlungsstärke mit dem Sensor erfassen. Auf Grund der linearen Diskretisierung des Sensorausgangssignals mit einem ADC, ergibt sich demzufolge eine grobe Auflösung bei großen Bestrahlungsstärken und eine feine Signalaufösung bei kleinen Bestrahlungsstärken. Die Photospannungen der einzelnen Photodioden können über einen on-chip Multiplexer auf einen gemeinsamen Ausgang geschaltet werden. Mit Hilfe der sensorinternen Adressierungslogik und infolge des nichtintegrierenden Verhaltens der Einzeldetektoren ist ein freier softwaregesteuerter Zugriff auf die einzelnen Sensorelemente möglich.

Für die Ansteuerung des Detektors wurde eine spezielle **Sensorelektronik** entwickelt. Bei der Entwicklung der Detektorelektronik galt es, die maximale Pixelauslesefrequenz des Sensors von 500kHz auszunutzen und gleichzeitig eine A/D-Wandlungsaufösung zu erreichen, die geringer als das Detektorrauschen ist. Geht man von den Herstellerangaben aus, muß ein Spannungsbereich von 360mV für sechs Dekaden Bestrahlungsstärke am Sensorausgang erfaßt werden. Berücksichtigt man ferner ein Festmutterrauschen von $\pm 60mV$ und ein Detektorrauschen von $\sigma U_{pd} = 0.2mV$, ist eine 12Bit A/D-Wandlung notwendig, damit das Quantisierungsrauschen kleiner als das Detektorrauschen ist. In Abbildung 5.9 ist ein

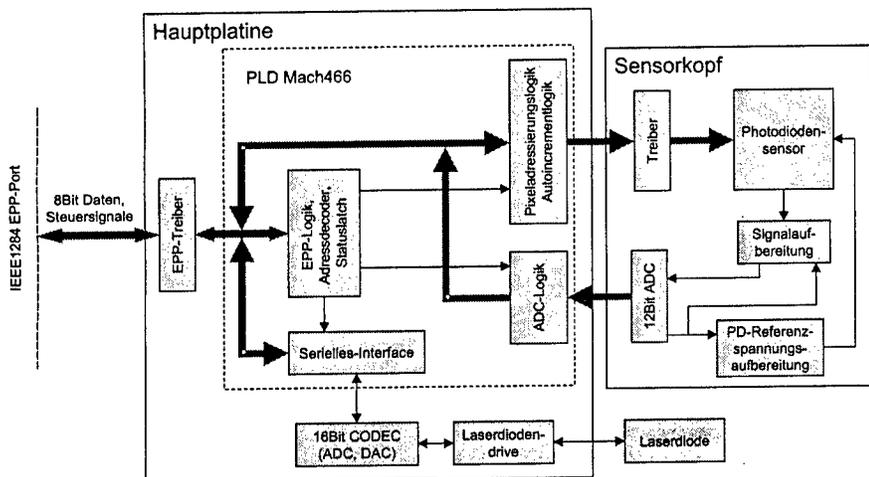


Abbildung 5.9: Blockschaltbild der Sensorelektronik des planaren Streulichtensors

Blockschaltbild der entwickelten Sensorelektronik dargestellt. Um den eigentlichen Streulichtmeßkopf möglichst klein zu halten, wurde die Sensorelektronik auf zwei Platinen aufgeteilt, einer Sensorkopfplatine und einer Hauptplatine. Die Sensorkopfelektronik besteht im wesentlichen aus dem Photodiodensensor, einer analogen Signalaufbereitungsstufe zur Anpassung des Sensorausgangs an den ADC Eingang, einem 12Bit ADC und einem Signaltreiber bzw. Adressregister. Damit eine hohe Stabilität der Meßwerte und eine möglichst gute

Entkopplung von externen Einflüssen (z.B. Schwankungen in der Spannungsversorgung des Analogteils, Schwankungen infolge der Änderung der Umgebungstemperatur) erreicht werden kann, werden die Quellspannung der Photodioden und die Versorgungsspannung der Signalaufbereitungsstufe aus der Referenzspannung des ADC gewonnen. Durch die Verwendung eines 12Bit ADCs mit einer Wandlungszeit von 800ns ist eine zeitliche Überabtastung des Photodiodenausganges auch bei der maximalen Pixelausleserate des Detektors von $0.5\text{Pixel}/\mu\text{s}$ möglich. Die Hauptplatine enthält die Schnittstelle zum Rechner, die gesamte Steuerungslogik und ein Laserdiodenmodul. Als Schnittstelle für die Daten- und Kommandoübertragung wird der Parallel Port des PCs im EPP (enhanced parallel port) Modus nach IEEE1284 verwendet. Mit diesem Schnittstellenmodus lassen sich Datenübertragungsraten von bis zu 2MByte/s erreichen. Die gesamte Logik, bestehend aus EPP-Logik, seriellen CODEC-Interface, ADC-Logik und Adressierungslogik ist in einem programmierbaren Logikbaustein (PLD programmable logic device) untergebracht. Mit Hilfe der ADC-Logik ist eine Umschaltung zwischen einer schnellen 8Bit Übertragung der höherwertigen ADC-Bits oder einer auf zwei Bytes aufgeteilten Datenübertragung der 12Bit des ADC möglich. Um das Senden eines zusätzlichen Adressierungskommandos zwischen der Abtastung zweier aufeinanderfolgender Pixel zu vermeiden, bietet die Adressierungslogik die Möglichkeit, die X-Adresse zur Sensoradressierung (entspricht der Winkelposition α_i) automatisch zu inkrementieren. Mit der Bereitstellung eines seriellen CODEC-Interfaces wird eine Ansteuerung des ebenfalls auf der Hauptplatine enthaltenen **Lasermoduls** über einen A/D und D/A Wandler realisiert. Das Lasermodul kann in den Betriebsarten konstanter Laserdiodenstrom oder im rückgekoppelten Regelkreis mit konstanter optischer Leistung betrieben werden. Der maximal zulässige Laserdiodenstrom beträgt 100mA .

5.4.2 Radiometrisches Modell

Analog zu dem bereits erläuterten Modell des faseroptischen Streulichtsenors soll im folgenden ein entsprechendes Modell für den planaren Streulichtsensor diskutiert und das radiometrische Verhalten der einzelnen Photodioden sowie deren Eigenschaften bei der gesamtheitlichen Betrachtung der Mehrdetektoranordnung analysiert werden. Eine entsprechende Signalkette mit den berücksichtigten Signalanteilen ist in Abbildung 5.10 dargestellt. Das

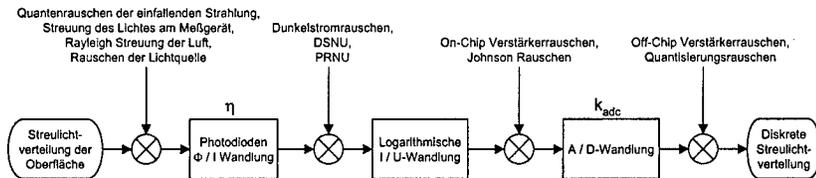


Abbildung 5.10: Signalkette des planaren Streulichtsenors

elektrische Verhalten einer einzelnen Photodiode kann als die Summe zweier Stromquellen betrachtet werden. Eine der Stromquellen stellt der durch die externe Vorspannung erzeugte Diodenstrom dar, der aufgrund seiner Unabhängigkeit von der auftreffenden Strahlungsleistung auch als Dunkelstrom I_d bezeichnet wird. Die zweite Stromquelle, der sog. Photostrom

I_p , ist durch den bereits erläuterten *Sperrschicht-Photoeffekt* gegeben und hängt im wesentlichen von der Wellenlänge und der Leistung des auftreffenden Lichtes ab. Der durch die Photodiode fließende Strom I_{pd} ergibt somit durch

$$I_{pd} = I_d - I_p = I_s \left(e^{\frac{eU_D}{k_B T}} - 1 \right) - I_p \quad k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}, \quad (5.18)$$

wobei der Dunkelstrom I_d für einen durch die elektrische Beschaltung der Photodiode gegebenen Arbeitspunkt konstant ist [14]. Dabei ist zu beachten, daß der Dunkelstrom I_d und damit auch das Dunkelstromrauschen exponentiell mit zunehmender Temperatur T steigen. Unter Verwendung von Gl. 5.3 ergibt sich der Photostrom I_p in Abhängigkeit von der einfallenden Strahlungsleistung Φ mit

$$I_p = e\eta\Phi \frac{\lambda}{hc}. \quad (5.19)$$

In Abbildung 5.11 ist der Aufbau der Sensorpixel des verwendeten Photodiodenarrays skizziert. Jeder Pixel bestehe aus einer Photodiode, einem Lastwiderstand R_L , einem Spannungsfolger M_1 und einem Selektionstransistor M_2 . Für eine zweidimensionale Adressierung enthält der Sensorchip außerdem pro Pixelspalte (Winkelposition) einen weiteren Selektionstransistor M_3 . Der Lastwiderstand wird durch einen MOS-Transistor in „weak inversion“ realisiert, wodurch eine logarithmische Strom-Spannungswandlung und damit auch eine logarithmische Wandlung von einfallender Strahlungsleistung zu meßbarer Photospannung gegeben ist.

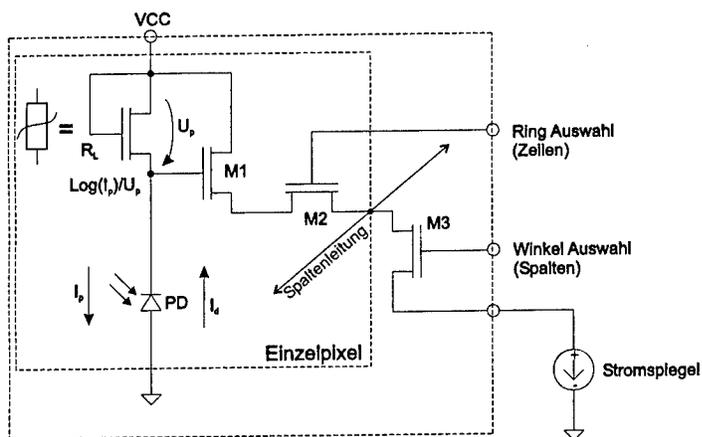


Abbildung 5.11: Elektronischer Aufbau einer einzelnen Photozelle des verwendeten Sensors.

Digitalisiert man nun die Photospannung am Ausgang des Sensors mit Hilfe eines A/D Wandlers, erhält man eine zum Logarithmus der Strahlungsleistung proportionale diskrete Größe.

$$n_{LSB} = k_{adc} \cdot \log(I_{pd}) = k_{adc} \cdot \log \left(I_d - \Phi \cdot \eta \cdot q \frac{\lambda}{hc} \right). \quad (5.20)$$

Die entsprechenden schaltungstechnischen Größen, wie die Offsetspannungen des ADC und der Photodioden, werden hierbei nicht berücksichtigt und haben auch auf das Verhalten des Sensors keinen Einfluß. Der Sensor wurde für die Messung von Bestrahlungsstärken in einem Bereich von 10^{-5} W/m^2 bis 100 W/m^2 konzipiert. Dabei ist zu beachten, daß bei konstanter Bestrahlungsstärke der Photostrom proportional zur photoaktiven Photodiodenfläche ist und sich damit aus den unterschiedlich großen photoaktiven Flächen der Pixel unterschiedliche Photoströme ergeben. Der Flächenfaktor zwischen den photoaktiven Flächen der inneren und äußeren Pixel beträgt ca. 1800. Um den resultierenden Einfluß auf die Photospannung zu verringern, wurden beim Entwurf des Sensors verschiedene Breiten des für die Strom-Spannungswandlung verwendeten MOS Transistors in Abhängigkeit von der Pixelfläche realisiert [64]. Eine vollständige Kompensation der Flächenabhängigkeit der Photospannung ist mit dieser technologischen Maßnahme nicht möglich, jedoch konnte die Abweichung in den Größenbereich des ohnehin vorhandenen Festmustersrauschens (FPN) gebracht werden. Zwei typische Kennlinien der flächenmäßig kleinsten und größten Photodioden sind in Abbildung 5.12 dargestellt. Das Festmustersrauschen ist deutlich als Offset zwischen den Kennlinien zu erkennen. Die ebenfalls zu erkennende Nichtlinearität bezüglich der logarithmierten Bestrahlungsstärke ist auf das im folgenden erläuterte dynamische Verhalten der Sensorzellen zurückzuführen. Eine Photodiode läßt sich in einer Ersatzschaltung

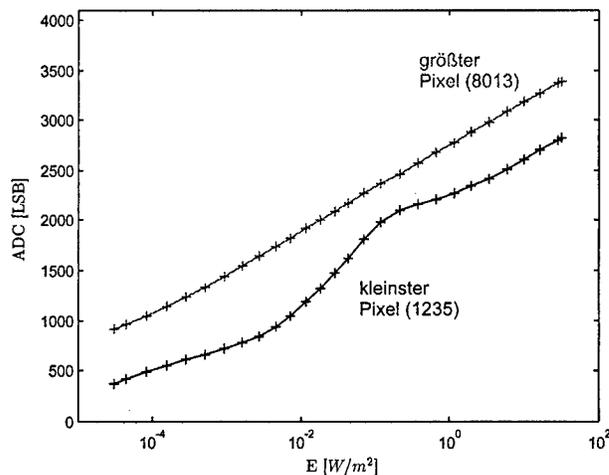


Abbildung 5.12: Photodiodenkennlinien jeweils eines der flächenmäßig kleinsten und größten Pixels.

als eine Parallelschaltung eines Widerstandes und einer Kapazität darstellen. Die Kapazität der Photodiode ist proportional zum Flächeninhalt der photoaktiven Fläche und stellt mit dem Lastwiderstand R_L ein RC-Glied und damit ein Verzögerungsglied erster Ordnung (T_1 -Glied) dar. Da der Lastwiderstand R_L des verwendeten Detektors eine nichtlineare Strom-Spannungskennlinie besitzt und damit einen von der Bestrahlungsstärke abhängigen veränderlichen Widerstand darstellt, ist das Zeitverhalten signalabhängig. Demzufolge ergibt sich für eine geringe Bestrahlungsstärke eine große Zeitkonstante und mit ansteigender Bestrah-

lungstärke eine fallende Zeitkonstante. Analog wirkt sich die Höhe der Bestrahlungsstärke auch bei einer Änderung der Ringadresse durch das Schalten des Photozellentransistors M_2 (s. Abbildung 5.11) auf das Zeitverhalten der Sensorantwort aus. Durch das Schalten des Transistors M_2 erfolgt eine kapazitive Kopplung der Photozellentransistoren mit der Photodiode, deren Photostrom wiederum die Photozellen in den Gleichgewichtszustand bringen muß. Da sich die eingekoppelte Kapazität nicht ändert, hängt die Erholungszeit der Photozelle von dem Photostrom und damit direkt von der einfallenden Strahlungsstärke ab. Dieser Effekt wirkt sich besonders stark bei den flächenmäßig kleinen Photodioden des Photodiodenarrays aus. Liest man den Sensor mit konstanter Adressierungsgeschwindigkeit bei verschiedenen Bestrahlungsstärken aus, verschiebt sich demzufolge der Abtastpunkt auf der Entladungskurve in Abhängigkeit von der Bestrahlungsstärke. In Abbildung 5.12 ist dieses Verhalten deutlich in der Kennlinie des flächenmäßig kleinsten Pixels zu erkennen. Dieser dynamische Effekt tritt nur bei Änderung der Ringadresse infolge des Schaltens von Transistor M_2 auf. Auf die Berücksichtigung des Festmustersrauschens und des dynamischen Verhaltens zur Meßwertkorrektur wird im Rahmen der Sensorkalibrierung in Kapitel 7.2 ausführlicher eingegangen.

5.4.3 Modell der Winkel- und Ortsfrequenzauflösung

Für eine vollständige Beschreibung der Eigenschaften des planaren Streulichtensors ist neben den im vorangegangenen Abschnitt erläuterten Detektorverhalten auch eine Beschreibung der geometrischen Größen des Sensors notwendig. Im folgenden soll ein entsprechendes Modell für die Winkel- und Ortsfrequenzauflösung des planaren Streulichtensors aufgestellt werden. Mit dem Modell soll eine Zuordnung der Einzeldetektorpositionen zu deren korrespondierenden räumlichen Positionen im BRDF-Koordinatensystem, s. Abbildung 4.3, ermöglicht werden. Die zugrundeliegenden geometrischen Verhältnisse sind in Abbildung 5.13 skizziert. Im oberen Teil der Abbildung sind das lokale Sensorkoordinatensystem in Polarkoordinaten und ein Bild der Photodiodenanordnung dargestellt. Auf dem Sensorbild sind deutlich die radiale Änderung der Pixelgröße und die polare Anordnung der Photodioden zu erkennen. Der Detektor besteht aus einer Anordnung von 8013 Photodioden in 76 konzentrischen Ringen, wobei die Ringdurchmesser für die inneren Ringe (*Fovea*) von Ring 0 bis 20 linear ansteigen und für die äußeren Ringe (*Retina*) von Ring 21 bis 75 exponentiell ansteigen. Für die äußeren Ringe ist eine konstante Winkelauflösung mit 128 Pixeln pro 360° gegeben, woraus folgt, daß auch die Pixelfläche exponentiell mit dem Radius ansteigt. In Bezug auf die Pixelfläche ist außerdem zu beachten, daß der Füllfaktor von den inneren zu den äußeren Photodioden von 20% auf 95% ansteigt und aufgrund des Sensorlayouts auch innerhalb eines Ringes von Pixel zu Pixel schwankt. Zur Beschreibung der Winkelauflösung des Sensors ist eine vereinfachte Beschreibung der Pixelflächen unter der Annahme eines Füllgrades von 100% für die photoaktive Pixelfläche ausreichend. Für die Berechnung der BRDF wird im Rahmen der Sensorkalibrierung eine Vorgehensweise vorgeschlagen, welche unabhängig von der Fläche der Photodetektoren eine exakte radiometrische Auswertung zuläßt. Als Referenzsystem für das geometrische Sensormodell dient das im unteren Teil der Abbildung 5.13 dargestellte kartesische Koordinatensystem, dessen Z-Achse durch die Oberflächennormale definiert ist und für einen beliebigen Punkt auf der Probenoberfläche gelten soll. Ziel ist es nun, durch eine geeignete Transformation das lokale Sensorkoordinatensystem in die Kugelkoordinaten des BRDF-Koordinatensystem zu überführen. Ausgangspunkt für die Transformation ist die Definition der Sensorebene in der X-Y-Ebene des kartesischen Ko-

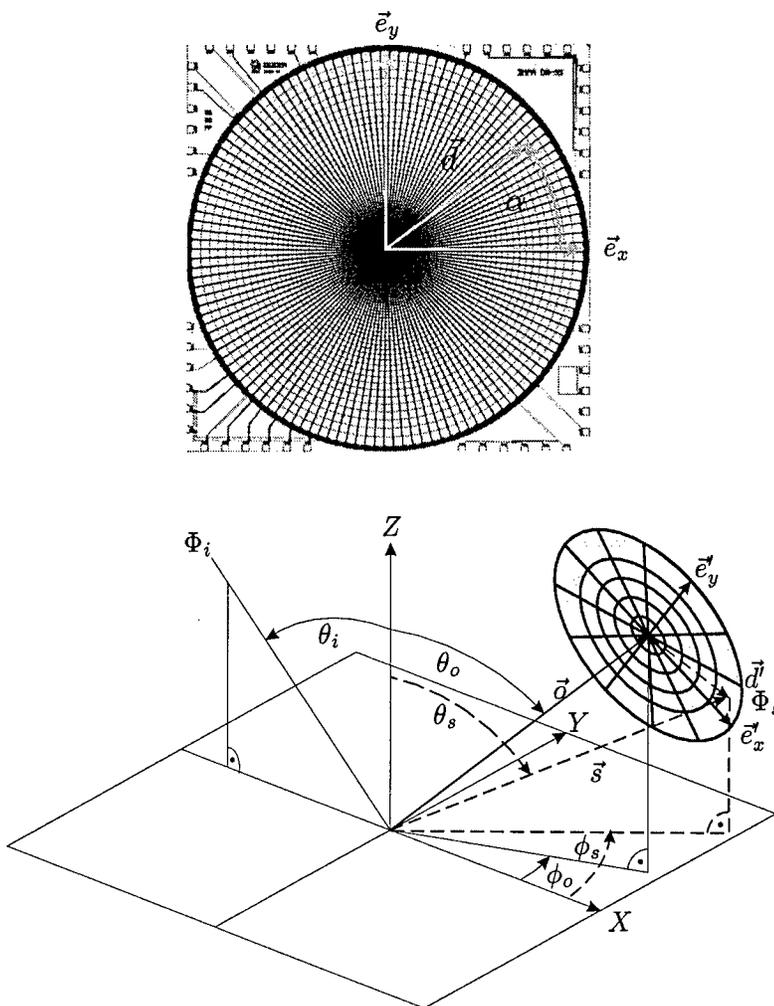


Abbildung 5.13: Geometrische Definitionen am planaren Streulichtsensor, oben: das lokale Sensorkoordinatensystem, unten: das globale BRDF-Koordinatensystem.

ordinatensystems, wobei der Ursprung des lokalen Sensorkoordinatensystems im Ursprung des BRDF-Koordinatensystems und die X - und Y -Achsen der beiden Koordinatensysteme aufeinander liegen sollen. Somit ergibt sich die Position \vec{d}_i der Photodiode i in der X - Y -

Ebene in Polarkoordinaten (α_i, R_i) mit

$$\vec{d}_i = R_i \begin{pmatrix} \cos(\alpha_i) \\ \sin(\alpha_i) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.21)$$

wobei R_i den Radius des entsprechenden Detektorrings bezeichnet und α_i die Winkelposition des i -ten Einzeldetektors darstellt. Die Position des Sensorursprungs ist im BRDF-Koordinatensystem durch den Höhenwinkel θ_o , den Azimutwinkel ϕ_o und den Radius $R_o = |\vec{o}|$ gegeben. Dementsprechend ist die Transformation durch eine Rotation um die Y-Achse mit dem Winkel θ_o , eine anschließende Rotation um die Z-Achse mit dem Winkel ϕ_o und eine Translation um R_o entlang des rotierten Normalenvektors der Oberfläche \vec{e}_z gegeben. Definiert man die Rotationstransformationen in Matrizenschreibweise, lassen sich die Einzelrotationen zu einer Gesamtrotationsmatrix R_g zusammenfassen.

$$R_g = R(\vec{e}_z, \phi_o) \cdot R(\vec{e}_y, \theta_o) = \begin{pmatrix} \cos(\theta_o) \cos(\phi_o) & -\sin(\phi_o) & \sin(\theta_o) \cos(\phi_o) \\ \cos(\theta_o) \sin(\phi_o) & \cos(\phi_o) & \sin(\theta_o) \sin(\phi_o) \\ -\sin(\theta_o) & 0 & \cos(\theta_o) \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

Rotiert man nun den Normalenvektor \vec{e}_z der Oberfläche mit Hilfe der Rotationsmatrix R_g und skaliert den so erhaltenen Normalenvektor des Detektors mit R_o , erhält man den Ursprungsvektor \vec{o} zum Detektormittelpunkt.

$$\vec{o} = R_o \cdot R_g \cdot \vec{e}_z = R_o \begin{pmatrix} \sin(\theta_o) \cos(\phi_o) \\ \sin(\theta_o) \sin(\phi_o) \\ \cos(\theta_o) \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Unter Verwendung von Gl. 5.22 und Gl. 5.23 lassen sich nun beliebige lokale Sensorkoordinaten (α_i, R_i) in die entsprechenden kartesischen BRDF-Koordinaten \vec{s} überführen.

$$\begin{aligned} \vec{s} &= R_g \cdot \vec{d} + \vec{o} \\ &= \begin{pmatrix} R_i(\cos(\alpha_i) \cos(\theta_o) \cos(\phi_o) - \sin(\alpha_i) \sin(\phi_o)) + R_o \sin(\theta_o) \cos(\phi_o) \\ R_i(\cos(\alpha_i) \cos(\theta_o) \sin(\phi_o) + \sin(\alpha_i) \cos(\phi_o)) + R_o \sin(\theta_o) \sin(\phi_o) \\ -R_i \cos(\alpha_i) \sin(\theta_o) + R_o \cos(\theta_o) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.24)$$

Die Kugelkoordinaten ergeben sich durch Transformation aus den kartesischen Koordinaten mit

$$\cos \theta_s = \frac{s_x}{|\vec{s}|}; \quad \tan \phi_s = \frac{s_y}{s_x}; \quad \vec{s} = (s_x, s_y, s_z); \quad \theta_s = \{0 \dots \frac{\pi}{2}\}; \quad \phi_s = \{0 \dots 2\pi\}. \quad (5.25)$$

Analog zur Ortsfrequenzauflösung des faseroptischen Streulichtsensors kann auch für den planaren Streulichtsensor unter der Annahme der Gültigkeit der zweidimensionalen Gittergleichung 4.29 die resultierende Abstützung der Ortsfrequenzen mit Hilfe der obigen Winkelfunktionen für eine gegebene Sensorkonfiguration bestimmt werden, s. Abb. 5.14. In Tabelle 5.4 sind die Ortsfrequenzbereiche für die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Systemkonfigurationen angegeben.

5.4.4 Kalibrierung und Korrekturverfahren

Für die Messung einer BRDF mit dem planaren Streulichtsensor müssen die tatsächlichen Kennlinienverläufe der einzelnen Photodioden bekannt sein. Mit dem vorgestellten radiometrischen Modell ist zwar das prinzipielle Verhalten des Sensors beschrieben, jedoch die

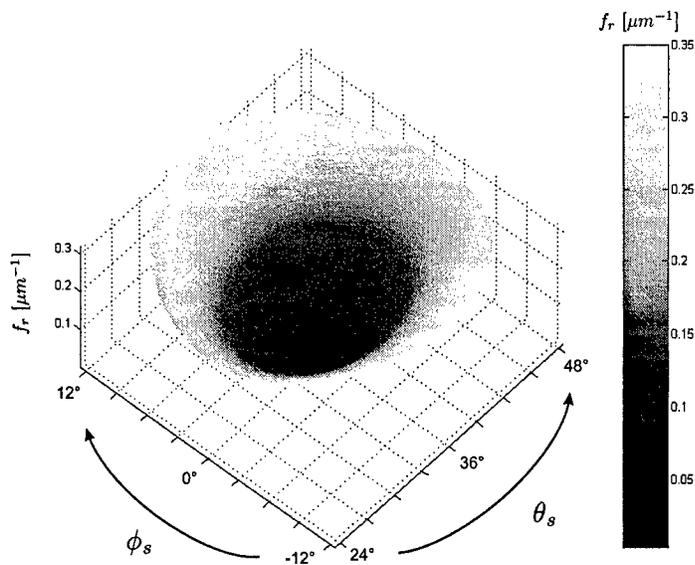


Abbildung 5.14: Ortsfrequenzverteilung der radialen Ortsfrequenz f_r über der Detektorfläche des planaren Streulichtensors für $\theta_i = 36^\circ$, $\theta_0 = 36^\circ$, $\phi_0 = 0^\circ$ und $R_0 = 20\text{mm}$.

fertigungsbedingten Schwankungen sowie die durch das Sensorlayout verursachte Variation der Kennlinienverläufe von Einzeldetektor zu Einzeldetektor sind mit diesem Modell nicht erfaßt und müssen somit experimentell bestimmt werden. Ziel ist es also, für jede Photodiode eine Funktion zu finden, welche die tatsächliche Photodiodenkennlinie möglichst gut beschreibt. Die gesuchte Funktion stellt demzufolge eine Zuordnung von am Sensorausgang gemessenen diskreten Signalwerten zur verursachenden radiometrischen Größe dar.

Zunächst stellt sich die Frage, in Bezug auf welche radiometrische Größe der Sensor kalibriert werden sollte. Hierfür bietet sich eine Kalibrierung bezüglich der Strahlungsleistung, der Strahlstärke (Strahlungsleistung bezogen auf den Raumwinkel) oder der Bestrahlungsstärke (Strahlungsleistung pro Flächeneinheit) an. Berücksichtigt man die im letzten Abschnitt geschilderte Problematik der Modellierung der tatsächlichen photoaktiven Pixelflächen, ist es sinnvoll, die Kalibriergröße so zu wählen, daß die Pixelflächen keinen Einfluß auf die Berechnung der eigentlichen Meßgröße (der BRDF) haben. Demzufolge muß der Sensor in Bezug auf die einfallende Bestrahlungsstärke kalibriert werden. Dadurch wird neben der einfallenden Strahlungsleistung auch die tatsächlich photoaktive Pixelfläche berücksichtigt. Analog dazu wäre auch die Kalibrierung in Bezug auf die Strahlstärke möglich, jedoch ist diese, da die Strahlstärke vom Raumwinkel abhängt, nur für einen festen Abstand von der Oberfläche gültig.

Geht man nun davon aus, daß der kalibrierte Sensor Bestrahlungsstärken mißt, ist eine ent-

sprechende Umstellung des Strahldichte-Terms der BRDF Definition nach Gl. 4.21 notwendig. Substituiert man die gemessene Strahlungsleistung Φ_s eines Detektors mit dem Äquivalent aus dem Produkt von Bestrahlungsstärke E_s und Pixelfläche A_s und approximiert den zugehörigen Raumwinkel Ω_s mit Hilfe der projizierten Detektorfläche $A_s \cos(\theta_s - \theta_0)$, erhält man folgenden Ausdruck für die Strahldichte L_s eines Einzeldetektors (A_o symbolisiert die Fläche des Beleuchtungsflecks).

$$L_s = \frac{\Phi_s}{A_o \cos(\theta_s) \Omega_s} = \frac{E_s A_s}{A_o \cos(\theta_s) \frac{A_s \cos(\theta_s - \theta_0)}{R_s^2}}; \quad R_s = |\vec{s}| \quad (5.26)$$

Setzt man Gl. 5.26 in die Definition der BRDF ein, erhält man einen Ausdruck, der unabhängig von der Detektorfläche A_s ist.

$$BRDF = \frac{L_s}{E_i} = \frac{E_s R_s^2}{\Phi_i \cos(\theta_s) \cos(\theta_s - \theta_0)} \quad (5.27)$$

Daraus folgt, daß unter der Voraussetzung der Kalibrierung des planaren Streulichtensors in Bezug auf die Bestrahlungsstärke, eine Messung der BRDF ohne den Fehlereinfluß der teilweise nur sehr ungenau bekannten photoaktiven Detektorflächen möglich ist. Ausgangspunkt für die damit notwendige experimentelle Bestimmung der Kennlinien ist ein Versuchsaufbau, der eine Variation der Bestrahlungsstärke über den gewünschten Größenbereich zuläßt. Dabei muß gewährleistet sein, daß die auf den Detektor einfallende Bestrahlungsstärke nicht nur integral gemessen werden kann, sondern auch ihre örtliche Variation über die Detektorfläche bekannt ist. In Kapitel 7.2 wird der verwendete Kalibrieraufbau beschrieben und auf die Leistungsfähigkeit verschiedener Kennlinienapproximationen eingegangen.

5.4.5 Theoretische Betrachtungen zu den Eigenschaften des ebenen Streulichtensors

Schlußfolgernd aus den vorangegangenen Überlegungen und unter Berücksichtigung der stochastischen Einflußgrößen werden in diesem Abschnitt die Eigenschaften des planaren Streulichtensors bezüglich der Messung der BRDF abgeschätzt. Im Gegensatz zum faseroptischen Sensor sind für den planaren Streulichtsensor die inneren Detektorparameter, wie Quanteneffizienz der Photodioden und die Größen der Lastwiderstände, quantitativ nicht bekannt. Da für die Kalibrierung des Sensors diese Größen ohnehin nicht benötigt werden, ist eine genauere Bestimmung auch nicht notwendig. Die in Tabelle 5.4 angegebenen äußeren Detektorkonstanten beziehen sich auf Herstellerangaben [65], auf die tatsächlich gemessenen Detektorgrößen wird im Rahmen der Sensorkalibrierung im Kapitel 7.2 eingegangen. Die ebenfalls in Tabelle 5.4 aufgeführten Sensorkonfigurationen entsprechen den beiden in dieser Arbeit verwendeten geometrischen Anordnungen. Beide Konfigurationen sind so ausgelegt, daß sie eine Messung der BRDF um den direkten Reflex herum erlauben, d.h. bei beiden Anordnungen befindet sich der direkte Reflex im Mittelpunkt des Sensors. Die aus den verwendeten Einfalls- und Sensorwinkeln resultierenden Ortsfrequenzen sind ebenfalls in Tabelle 5.4 aufgeführt. Hierbei ist bei der Auswahl des Lichtfleckdurchmessers zu beachten, daß die Periodenlänge der kleinsten theoretisch noch abgetasteten Ortsfrequenz bereits 3mm beträgt. Dementsprechend sollte der Lichtfleckdurchmesser größer als die größte abzutastende Ortsperiode sein.

Tabelle 5.4: Die Systemparameter des planaren Streulichtsenors für zwei Meßkonfigurationen und eine Lichtwellenlänge von $\lambda = 680\text{nm}$.

Sensorkonfigurationen	Konfiguration I $R_0=30\text{mm}$ $\theta_0 = 20^\circ, \theta_i = 20^\circ$	Konfiguration II $R_0=20\text{mm}$ $\theta_0 = 45^\circ, \theta_i = 45^\circ$
Streuwinkelbereich θ_s	$12^\circ \dots 28^\circ$	$33^\circ \dots 57^\circ$
Streuwinkelauflösung $\Delta\theta_s$	$0.02^\circ \dots 0.38^\circ$	$0.03^\circ \dots 0.57^\circ$
Ortsfrequenz f_x für $\phi_s = \phi_0 = 0$	$0.00032 \dots 0.2 \mu\text{m}^{-1}$	$0.00036 \dots 0.24 \mu\text{m}^{-1}$
Ortsfrequenz f_y für $\theta_s = \theta_0$	$0.00012 \dots 0.07 \mu\text{m}^{-1}$	$0.00036 \dots 0.21 \mu\text{m}^{-1}$
Raumwinkel der Einzeldetektoren Ω_s	$2.2 \cdot 10^{-8} \dots 4.2 \cdot 10^{-5} \text{sr}$	$5 \cdot 10^{-8} \dots 9.5 \cdot 10^{-5} \text{sr}$
polare Detektorpositionen α	$0^\circ \dots 360^\circ (2^\circ)$	
photosensitive Einzeldetektorfläche A_s	$20 \mu\text{m}^2 \dots 0.038 \text{mm}^2$	
Detektorausgang k_d	ca. 60mV pro Dekade Bestrahlungsstärke	
Rauschen am Detektorausgang σU_{pd}	ca. 0.2mV	
Festmutterauschen (FPN)	50 ... 100 mV	
Temperaturabhängigkeit	ca. 8mV / K	
ADC Konstante k_{ADC}	ca. 0.12mV / LSB	
Resultierende Systemparameter		
Kalibrierter Meßbereich E	$5 \cdot 10^{-5} \dots 50 \text{W/m}^2$	
SNR	28.2 ... 49.4 dB	

Im Gegensatz zum faseroptischen Sensor gibt es beim planaren Streulichtsensor keine begrenzende Apertur im Sichtbereich des Sensors, so daß die Apertur des Sensor durch die Apertur der Einzelpixel gegeben ist, welche nahezu der kompletten Hemisphäre über dem Detektor entspricht. Somit ist der Detektor auch sensitiv für störende Hintergrundstrahlung und Streueffekte außerhalb des beleuchteten Oberflächenausschnittes. Diese Tatsache muß bei der konstruktiven Gestaltung des Versuchsaufbaus in Abhängigkeit von der durchzuführenden Messung (beispielsweise durch den Einbau von zusätzlichen Blenden, bzw. Vorsatzoptiken und der Schwärzung aller im Sichtbereich des Sensors liegenden Komponenten) berücksichtigt werden. Eine quantitative Vorhersage der Hintergrundstreuung ist nicht möglich. Diese muß für eine konkrete Meßkonfiguration experimentell ermittelt werden.

Eine ebenfalls detektorunabhängige und ebenso limitierende Einflußgröße stellt das Quantenrauschen der detektierten Strahlung dar. Geht man von einer konstanten Bestrahlungsstärke aus, hängt die Anzahl der auftreffenden Lichtquanten und damit das Quantenrauschen von der photoaktiven Detektorfläche ab. Im linken Teil der Abbildung 5.15 sind das Quantenrauschen für den flächenmäßig kleinsten und den flächenmäßig größten Pixel und das Detektorrauschen in Abhängigkeit von der einfallenden Bestrahlungsstärke dargestellt. Entsprechend der Meßgröße sind die Rauschgrößen als rauschäquivalente Bestrahlungsstärken (NEI - noise equivalent irradiance) angegeben. Die der Berechnung des Quantenrauschens zugrunde liegenden Flächeninhalte entsprechen den tatsächlich vorhandenen photosensitiven Flächen⁸ innerhalb der Photodiodenstrukturen.

⁸Die Größen der photosensitiven Pixelbereiche wurden mit einem Auflichtmikroskop vermessen.

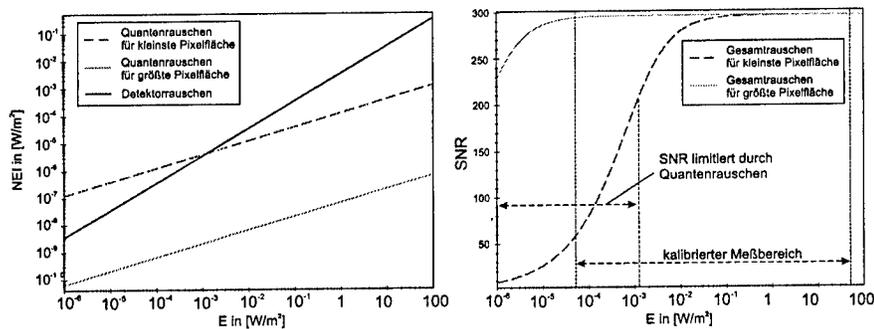


Abbildung 5.15: Links: Quantenrauschen im Vergleich zum Detektorrauschen in Abhängigkeit von der Bestrahlungsstärke, Rechts: relatives Signal zu Gesamtrausch Verhältnis in Abhängigkeit von der Bestrahlungsstärke.

Für das ebenfalls dargestellte Detektorrauschen wurden das Rauschen am Detektorausgang und das Quantisierungsrauschen berücksichtigt. Da das Festmustergerauschen eine örtliche Variation der Pixelkennlinien darstellt, welche durch die Kennlinienkalibrierung kompensiert wird, entfällt diese Signalkomponente bei der Betrachtung der Rauschprozesse. Mit Hilfe der Detektorkonstante k_d kann das als Rauschspannung ausgedrückte Detektorrauschen in eine rauschäquivalente Bestrahlungsstärke NEI_d für eine gegebene Bestrahlungsstärke E umgerechnet werden.

$$NEI_d(E) = E \cdot \underbrace{\frac{1}{k_d} \sqrt{\sigma U_{pd}^2 + \left(\frac{k_{adc}}{2\sqrt{3}}\right)^2}}_{\text{Detektorrauschen}} \quad (5.28)$$

Betrachtet man Abbildung 5.15, läßt sich feststellen, daß für die flächenmäßig kleinsten Pixel das Quantenrauschen bis zu einer Bestrahlungsstärke von ca. $10^{-3} W/m^2$ dominant ist, wogegen für die flächenmäßig größten Pixel das Detektorrauschen über den gesamten dargestellten Bestrahlungsbereich limitierend wirkt. Faßt man nun das Detektorrauschen und das Quantenrauschen zusammen, erhält man das tatsächliche Gesamtrauschen des Sensors und kann dementsprechend das Signal zu Gesamtrausch Verhältnis angeben.

Als charakteristische Kenngröße für Photosensoren mit einer linearen Kennlinie, wie beispielsweise CCDs, wird typischerweise das Signal zu Rausch Verhältnis als Verhältnis von Sättigungssignalwert zum kleinsten detektierbaren Signalwert, welcher im allgemeinen durch den Rauschsignalwert gegeben ist, verwendet. Wendet man diese Definition auf den beschriebenen Photodiodensensor an, so erhält man unter der Annahme eines Meßbereiches von $5 \cdot 10^{-5}$ bis $50 W/m^2$ und der Verwendung des Rauschens an der Untergrenze des Meßbereiches von $8.7 \cdot 10^{-7} W/m^2$ ein Signal zu Rausch Verhältnis von 155dB. Allerdings gibt diese SNR Angabe keine Auskunft über das tatsächliche SNR in einem bestimmten Punkt der Photodiodenkennlinien. Problematisch bei dieser Definition der Kenngröße ist, daß sich für den Photodiodensensor infolge seiner nichtintegrierenden Signaldetektion kein exaktes Sättigungssignal definieren läßt und der Wert des kleinsten detektierbaren Signales aufgrund der

logarithmischen Kennlinie nur beschränkt aussagefähig für das Signal zu Rausch Verhältnis ist.

Sinnvoller für die Beurteilung der Leistungsfähigkeit des Sensors ist daher ein SNR, welches von einem signalabhängigen Rauschen ausgeht.

$$SNR = \frac{E}{NEI} = \frac{E}{\sqrt{NEI_q^2 + NEI_d^2}} = \sqrt{\frac{1}{\underbrace{\frac{h \cdot c}{E \cdot A \cdot \lambda}}_{\text{Quantenrauschen}} + \underbrace{\frac{1}{k_d^2} \left(\sigma U_{pd}^2 + \left(\frac{k_{adc}}{2\sqrt{3}} \right)^2 \right)}_{\text{Detektorrauschen}}}} \quad (5.29)$$

Die daraus resultierende SNR-Funktion ist im rechten Teil der Abbildung 5.15 dargestellt. Beiden Kurven liegt das Gesamtrauschen aus Detektorrauschen und Quantenrauschen der flächenmäßig kleinsten bzw. größten Pixeln zugrunde. Es ist deutlich der mit zunehmender Bestrahlungsstärke abnehmende Einfluß des Quantenrauschens auf das SNR zu beobachten.

Kapitel 6

Meßaufbau

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Versuchsaufbau realisiert, welcher Untersuchungen zur Leistungsfähigkeit der Streulichtsensoren und einen Vergleich mit anderen Meßgeräten zuläßt. Es werden dabei die Meßprinzipien Raster-Kraft-Mikroskopie (AFM) und Streulichtanalyse in einem Meßaufbau vereint. Die Meßsysteme sind in den Aufbau derart integriert, daß die Probe für eine Untersuchung mit den einzelnen Meßsystemen in der Probenhalterung verbleiben kann. Somit ist gewährleistet, daß bei einer Untersuchung mit unterschiedlichen Sensoren der gleiche Bereich der Probe betrachtet werden kann und ein reproduzierbarer Vergleich der Meßergebnisse möglich ist. Ein Bild des Versuchsaufbaus ist in Abbildung 6.1 zu sehen. Die einzelnen Meßsysteme verfügen über separate Halterungen und Verstelleinrich-

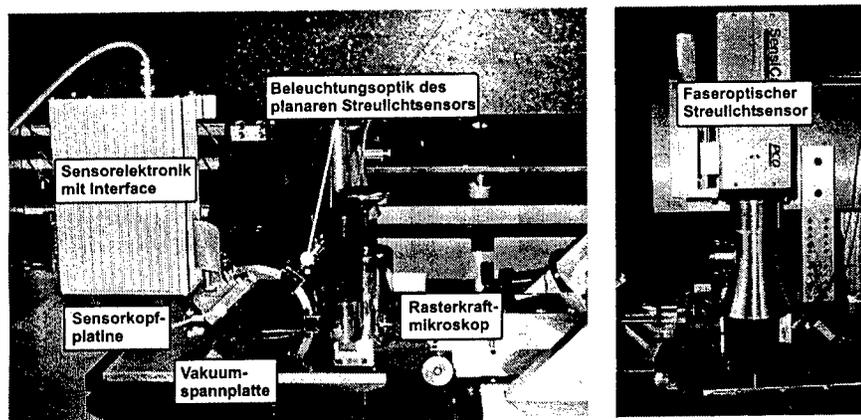


Abbildung 6.1: Bild des Versuchsaufbaus mit den Meßsystemen: Rasterkraftmikroskop, faseroptischer Streulichtsensor und planarer Streulichtsensor. Links: Vorderansicht, rechts: Ansicht von der Rückseite.

tungen, die eine individuelle Anpassung der Arbeitsbereiche der Meßgeräte an die Probenhöhe erlauben. Als Probenhalterung stehen eine Universalvakuumspannplatte und ein um drei Achsen verstellbarer Probentisch zur Verfügung. Die Vakuumspannplatte verfügt über

vier getrennte Ansaugbereiche, welche separat betrieben werden können. Der notwendige Unterdruck wird durch eine Vakuumpumpe bereitgestellt.

Die eigentliche Probenzuführung wird durch einen Zweiachsen-Positioniertisch der Fa. LPKF mit einem Bewegungsbereich von $200 \times 200 \text{ mm}^2$ realisiert. Der Tisch ist luftgelagert und wird mit zwei Tauchspulenmotoren angetrieben [38]. Das in den Tisch integrierte Wegmeßsystem erlaubt in Verbindung mit der Motorsteuerung eine mikrometergenaue Positionierung. In der Mitte des Tisches¹ wird eine Positioniergenauigkeit von $\pm 2 \text{ }\mu\text{m}$ erreicht. Mit Hilfe der intelligenten Bahnsteuerung des Tisches ist ein Abrastern der Proben und ein automatisches Anfahren der Meßpositionen unterhalb der Meßgeräte möglich.

Um eine ausreichende Schwingungsisolation für das AFM zu gewährleisten, wurde der gesamte Aufbau auf vier Druckluftschwingungsisolatoren gelagert.

Besonders für die Streulichtmessung an glatten Oberflächen und für Partikel- und Defektmessungen sind in Abhängigkeit von der zu untersuchenden Strukturgröße zum Teil hohe Reinraumanforderungen zu erfüllen. Um eine Kontamination der Proben während der Messung und damit auch eine Verfälschung der Meßergebnisse zu minimieren wurde der gesamte Meßaufbau mit einer Laminarbox umbaut. Der kontinuierlichen Luftstrom innerhalb der Laminarbox vermindert die Verschmutzung des Versuchsaufbaus und der Proben durch Staubpartikel.

Die in Kap. 5 beschriebenen Streulichtsensoren sind über separate Höhenversteller in den Meßaufbau integriert. Die Beleuchtungsoptiken können für beide Sensoren getrennt variiert werden und es besteht die Möglichkeit, den reflektierten Strahlanteil über ein Spiegelsystem in eine Strahlfalle zu lenken. Besonders die Detektion von kleinsten Partikeln auf glatten Oberflächen erfordert den Einsatz einer großen Strahldichte im Beleuchtungsweig bei gleichzeitig minimaler Streuung im Meßsystem und macht somit den Einsatz einer Strahlfalle zwingend notwendig.

6.1 Rasterkraftmikroskop

Für eine Analyse des Zusammenhangs zwischen Oberflächentopographie und Streuverteilung ist es notwendig, ein profilometrisches Meßgerät in den Meßaufbau zu integrieren. Aufgrund der zu betrachtenden Größenordnung der Topographiestrukturen wurde ein Rasterkraftmikroskop als Vergleichsmeßgerät ausgewählt.

Das Rasterkraftmikroskop liefert ein Höhenbild der Oberfläche, indem mit einer sehr feinen Spitze die Oberfläche zeilenweise abgerastert und an jedem Punkt (x, y) die Höhe $z(x, y)$ aufgenommen wird. Die Spitze hat einen Radius von weniger als 50 nm und ist auf einer Cantileverfeder befestigt [22], deren Federkonstante so gewählt ist, daß die Interaktionskraft an der Oberfläche im Bereich von μN und kleiner ist. In der Regel verwendet man ein Kompensationsverfahren, um eine konstante Interaktionskraft bei Auslegung des Cantilevers an der Oberfläche zu erreichen. Die meßtechnische Erfassung der Auslenkung des Cantilevers kann auf unterschiedlichen Verfahren beruhen, z.B. interferometrisch, über eine optische Triangulationsanordnung, über einen kapazitiven Wegsensor oder einen Piezowiderstand. Das im

¹Das Meßsystem verwendet die Mitte des Tisches als Bezugspunkt und erreicht an dieser Stelle die höchste Positioniergenauigkeit.

Meßaufbau eingesetzte AFM „Accurex“ der Fa. Topometrix verwendet eine Lasertriangulationsanordnung zur Detektion der Cantileverauslenkung, s. Abbildung 6.2. Als Detektor

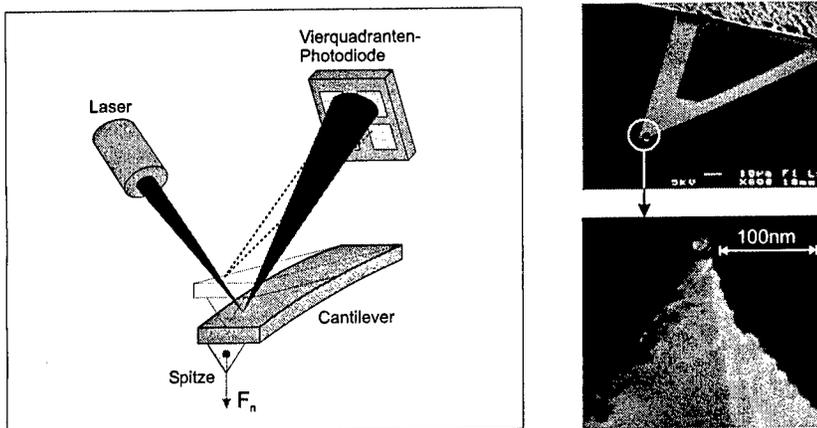


Abbildung 6.2: Links: Prinzip des verwendeten AFM-Meßkopfes, rechts: Rasterelektronenmikroskopaufnahme eines Cantilevers der Fa. Digital Instruments.

kommt eine Vierquadranten-Photodiode zum Einsatz, deren Differenz und Summensignale als Eingangssignale für ein Kompensationsmeßverfahren dienen. Ein entsprechender digitaler PID-Regler stellt den Z-Piezo des Meßkopfes so lange nach, bis der am Cantilever reflektierte Laserstrahl wieder in der Mitte des Photodetektors ist. Der eigentliche Höhenwert wird dann am Z-Piezo mit Hilfe eines Dehnmeßstreifens gemessen. In den AFM-Kopf können zwei verschiedene Piezo-Scanner eingebaut werden, wodurch unterschiedliche Bewegungsbereiche realisiert werden können. Mit der durch drei Piezostangen angetriebenen AFM-Kopf-Scanner-Kombination kann ein Bereich von maximal $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ abgerastert und dabei ein Höhenbereich von maximal $10 \mu\text{m}$ erfaßt werden. Bei Verwendung eines Scanners, bei dem die Bewegung entlang der drei Achsen durch eine Piezostange erfolgt, ergibt sich ein Meßvolumen von maximal $2 \times 2 \times 1 \mu\text{m}^3$. Das verwendete Rasterkraftmikroskop kann sowohl im Kontaktmode als auch im Nichtkontaktmode betrieben werden. Im Kontaktmode wird die Auslenkung der Spitze bei Annäherung an die Probenoberfläche mit Hilfe der Photodioden detektiert und mit dem Regelkreis kompensiert. Beim Nichtkontaktmode wird die Spitze in Schwingung versetzt und die Dämpfung der Cantileverschwingung bei Annäherung an die Probenoberfläche gemessen. Im allgemeinen stellt die *van-der-Waals-Kraft* die wesentliche Komponente der Anziehungskraft für die Auslenkung des Cantilevers oder die Dämpfung der Cantileverschwingung dar. Für eine ausführlichere Erläuterung des AFM-Meßprinzips wird auf die Literatur [22, 87] verwiesen.

6.2 Gerätesteuerung

Für die Steuerung der Komponenten des Versuchsaufbaus und zur Auswertung der Meßdaten wurden im Rahmen der Arbeit zwei Programme („Slpix“ und „Slfuga“) zur Ansteuerung der Streulichtsensoren und ein Programm („Classify“, s. Anhang A) für die Klassifikation von Streulichtmeßdaten entwickelt. Neben diesen Programmen wurden eine Reihe von Funktionen für die off-line Meßauswertung beruhend auf dem Programmsystem „Matlab“ entwickelt.

Die für die Steuerung des faseroptischen Streulichtensors und des Positioniertisches entwickelte Gerätesoftware „Slpix“ beruht auf einem objektorientierten Ansatz und wurde in der Programmiersprache „C++“ für das Betriebssystem „Windows 95“ implementiert, s. Abb. 6.3. Wesentlicher Bestandteil der Software ist die Bereitstellung der notwendigen Funktionalitäten zur Ansteuerung, Kalibrierung und Konfigurierung der Streulichtsensoren und des Positioniertisches. Mit dem Programm können sowohl Einzelmessungen als auch Raster-scans an Probenoberflächen durchgeführt werden. Ebenfalls in die Software integriert ist das in Kapitel 5.3 vorgestellte Sensormodell und das in Abschnitt 5.3.5 vorgeschlagene Kalibrierverfahren für den faseroptischen Sensor. Wie in diesem Zusammenhang bereits erläutert wurde, ist für eine Erhöhung der meßbaren Signaldynamik eine adaptive Steuerung der Integrationszeit der einzelnen Lichtwellenleiterpixel notwendig. Durch eine entsprechende Integrationszeitregelung können Streulichtsignalwerte über mehrere Dekaden hinweg erfaßt werden. In der Gerätesoftware wurden folgende Integrationszeitsteuerungen für die Streulichtmessung mit dem faseroptischen Streulichtsensor implementiert:

- **Verwendung einer konstanten Integrationszeit.** Dieser Modus ist besonders für die Messung von Streulichtverteilungen mit einer geringen Signaldynamik geeignet und stellt den schnellsten Meßmodus dar, da nur eine Integrationszeit in die Meßzeit eingeht.
- **Verwendung einer konstanten Anzahl von vorgegebenen Integrationszeitstufen.** Dieses Verfahren erlaubt die Erfassung von Streulichtverteilungen mit einer die Kameradynamik überschreitenden Signaldynamik. Von Vorteil ist hierbei, daß die Meßzeit, aufgrund der festen Anzahl von vorgegebenen Integrationszeitstufen, konstant ist. Nachteilig ist, daß mit der Vorgabe der Integrationszeitstufen der maximale Dynamikbereich des erfassbaren Signals festgelegt ist und somit keine Adaption an die bei der Messung tatsächlich vorhandene Signaldynamik möglich ist.
- **Automatische Wahl der Integrationszeiten.** Bei diesem Verfahren wird die Integrationszeit stufenweise innerhalb eines vorgegebenen Bereichs erhöht. Dabei wird die Integrationszeit so lange erhöht, bis entweder die maximale Integrationszeit erreicht wurde, oder alle Meßpunkte gültige Werte angenommen haben. Auf Grund der unbestimmten Anzahl von Integrationszeitstufen, die während der Messung notwendig sind, kann bei diesem Verfahren nicht von einer konstanten Meßzeit ausgegangen werden.

Bei den genannten Integrationszeitverfahren wird außerdem geprüft, ob alle Meßpunkte einer Messung gültig sind. Ein Meßpunkt ist genau dann gültig, wenn keiner der Pixel in der Faserumgebung F_s einen Überlauf hat, und der Signalwert des Meßpunktes größer als das

Dunkelsignal $dsnu$, ist. Eine Einschrankung dieses Wertebereichs ist durch Verwendung von entsprechenden Mewertstranken mglich. Damit kann nach einer ausgefhrten Messung eine Aussage ber deren Gltigkeit getroffen werden. Ebenfalls in die Software integriert sind verschiedene Verfahren zur Auswertung von Einzelmessungen und Rastermessungen. Es werden die folgenden on-line Auswertemglichkeiten zur Verfgung gestellt:

- Ausgabe von verschiedenen Mewertgraphen, wie: Rohdaten, BRDF, PSD (unter Verwendung der *Rayleigh-Rice* Streulichtapproximation), AKF (aus der PSD berechnet), winkelabhangiges Streulichtintegral (TIS).
- Berechnung von 18 verschiedenen Merkmalen (statistische Momente, Momente der PSD und davon abgeleitete Merkmale), s. Kap. 4.5.
- On-line Klassifikation der Messungen unter Vorgabe der Klassifikationsparameter. Als Klassifikationsaussage erhalt man eine Gruppenzugehrigkeit der aktuellen Messung und eine Aussage ber die statistische Sicherheit des Klassifikationsergebnisses, s. Anhang A.
- Darstellung der Merkmale der Messungen eines Rasterscans als Merkmalskarte mit Zugriffsmglichkeit auf die Einzelmessungen und damit auf deren Auswertemglichkeiten.

Fr den planaren Streulichtsensor wurde ebenfalls eine Software zur Geratesteuerung entwickelt. Die Software stellt im wesentlichen die notwendigen Funktionalitaten zur Ansteuerung und Kalibrierung des planaren Streulichtensors und zur Ansteuerung des Positionierisches bereit. Mit dem Programm knnen sowohl Einzelmessungen als auch Rasterscans durchgefhrt werden. Mit Hilfe der ebenfalls implementierten on-line Mewertkorrektur (entsprechend den in Kap. 5.4 vorgestellten Sensormodell und Kalibrierverfahren) liegen die Meresultate nach einer Messung als absolute radiometrische Gre vor. Die Software erlaubt sowohl das vollstandige Auslesen des gesamten Sensors als auch das selektive Auslesen einer vorgegebenen Menge von Pixeln. Auerdem wurden folgenden Mewernerfassungsmodi implementiert:

- Im Modus **Schnelles Auslesen** werden die Pixel mit maximaler Geschwindigkeit adressiert und jeder Pixel wird nur einmal durch den ADC abgetastet.
- Im Modus **Mittelwert** wird jeder Pixel mit einer vorgegebene Anzahl von Wiederholungen ausgelesen und ein mittlerer Signalwert berechnet. Mit diesem Modus kann der Einflu des Detektorrauschens minimiert und damit das Signal zu Rausch Verhaltis verbessert werden.
- Im Modus **Schwellwert** wird das Auslesen eines Pixels so lange wiederholt, bis die Differenz zwischen dem aktuellen Signalwert und dem zeitlich vorangegangenen Signalwert kleiner als eine vorgegebene Schranke ist. Geht man von einer wahrend der Messung zeitlich konstanten Streulichtverteilung aus, reduziert dieser Auslesemodus den systematischen Fehler, welcher durch die Abhangigkeit des dynamischen Verhaltens von der einfallenden Bestrahlungsleistung verursacht wird, siehe Kap. 5.4.2.

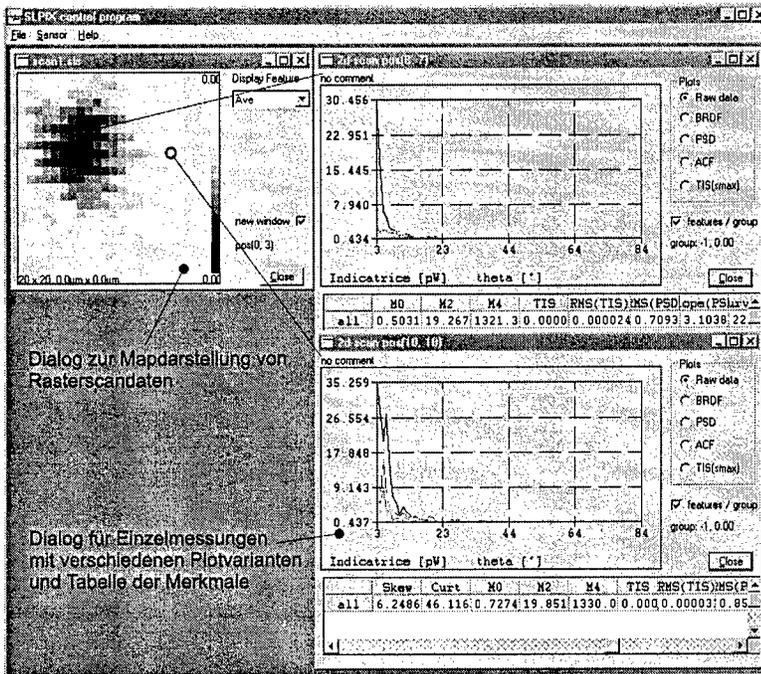


Abbildung 6.3: Bild der Gerätesoftware des faseroptischen Streulichtsenors.

Auf die Implementation einer weiterführenden on-line Datenauswertung in die Gerätesoftware des planaren Streulichtsenors wurde aus Aufwandsgründen verzichtet. Eine Auswertung der Streulichtmessungen erfolgt mit entsprechenden „Matlab“ Modulen.

Für die Steuerung des Rasterkraftmikroskopes und die Vorverarbeitung von AFM-Messungen steht ein kommerzielles Softwarepaket der Fa. TopoMetrix zur Verfügung. Weiterführende Auswertungen von AFM-Aufnahmen wurden ebenfalls in Form von „Matlab“ Modulen implementiert.

Kapitel 7

Experimente

Einen Schwerpunkt der Arbeit stellt die experimentelle Charakterisierung der entwickelten Streulichtsensoren dar. Hierfür werden sowohl Experimente zur Bestimmung der radiometrischen Leistungsfähigkeit der Sensoren, als auch Experimente in Bezug auf die Eignung der Sensoren zur Oberflächenprüfung durchgeführt.

Ziel der radiometrischen Untersuchungen ist es, die Sensorkennlinie, das Sensorrauschen und das dynamische Verhalten anhand von Experimenten zu quantifizieren. Diese Untersuchungen sollen Gegenstand der folgenden Abschnitte zur Sensorkalibrierung des faseroptischen und des planaren Streulichtensors sein.

Ein weiterer Schwerpunkt liegt in der Durchführung von Streulichtmessungen an verschiedenen technischen Oberflächen. Hierbei sollen typische Anwendungsbereiche der Streulichtsensorik, wie die Rauheitsprüfung an glatten Oberflächen und die Oberflächendefektdetektion, an ausgewählten Beispielen untersucht werden. Zunächst wird ein Vergleich von Streulichtmeßergebnissen mit Rasterkraftmikroskopmessungen für glatte Stahloberflächen, die dem *Rayleigh-Rice-Smooth-Surface* Kriterium genügen, (s. Kap. 4.3) durchgeführt.

Eine Bestimmung der Leistungsfähigkeit der entwickelten Sensoren bezüglich der Erkennung von Defekten unterschiedlicher lateraler Ausdehnung erfolgt am Beispiel von Rasterscans auf Siliziumoberflächen, auf denen Polystyrenkugeln (PSL-Kugeln) mit Durchmessern im Bereich von 50 nm bis 10 μm aufgebracht sind.

Anhand von Messungen an rauen Oberflächen werden abschließend die Eigenschaften verschiedener Streulichtmerkmale untersucht und ihre Eignung zur Lösung des inversen Streuproblems analysiert. Durch das großflächige Abrastern der Probenoberflächen werden die örtlichen Variationen der Oberflächeneigenschaften mit Hilfe von zweidimensionalen Merkmalskarten sichtbar gemacht.

7.1 Kalibrierung des faseroptischen Streulichtensors

Die Kalibrierung des faseroptischen Streulichtensors erfolgt nach dem in Kap. 5.3.5 vorgestellten Verfahren und wird experimentell wie folgt durchgeführt. Zunächst werden nach dem vorgeschlagenen Zuordnungsverfahren die Faserpositionen im Kamerabild gesucht und

die entsprechenden Pixelumgebungen festgelegt. Anschließend werden anhand von Dunkel-signalmessungen die Dunkelsignalkorrekturwerte $dsnu_s$ bestimmt. Unter Verwendung der Dunkelsignalkorrekturwerte wird nachfolgend eine Messung an einer *Lambertschen* Oberfläche mit einer bekannten Reflektivität vorgenommen. Anhand dieser Messung und dem bekannten BRDF-Sollwert der Oberfläche wird der Korrekturwert k_s berechnet. Die damit erfolgte radiometrische Anbindung, erlaubt das absolute Messen von Strahlungsleistungen mit dem faseroptischen Streulichtsensor. Das Ergebnis der Kalibrierung wird anschließend mit Hilfe von weiteren Messungen an Streulichtstandards mit bekanntem Verlauf der BRDF verifiziert.

Für eine Kalibrierung und Verifikation der Streulichtsensoren stehen die folgenden **Streulichtstandards** zur Verfügung.

SRS99 : *Spectralon* Reflektionsstandard SRS-99-010 [50], die Reflektivität für eine Lichtwellenlänge von $\lambda = 670 \text{ nm}$ beträgt $p = 99\%$. Bei dieser Probe handelt es sich um einen *Lambertschen* Diffuser mit einem winkelunabhängigen BRDF-Wert von $p/\pi = 0.31 \text{ sr}^{-1}$.

SRS02 : *Spectralon* Reflektionsstandard SRS-02-010, die Reflektivität für eine Lichtwellenlänge von $\lambda = 670 \text{ nm}$ beträgt $p = 1.2\%$. Bei dieser Probe handelt es sich ebenfalls um einen *Lambertschen* Diffuser mit einem winkelunabhängigen BRDF-Wert von $3.8 \cdot 10^{-3} \text{ sr}^{-1}$.

NIST1 : Reflektionsstandard (25G1HPOL) des NIST [2]. Die zur Verfügung stehenden Referenzmessungen zeigen einen linearen Abfall der BRDF von $5 \cdot 10^{-3} \text{ sr}^{-1}$ bis $2.5 \cdot 10^{-3} \text{ sr}^{-1}$ im Winkelbereich von 30° bis 60° für einen Einfallswinkel von 10° .

NIST2 : Reflektionsstandard (9G16HPOL) des NIST. Referenzmessungen des NIST zeigen ein Plateau in der BRDF mit einem BRDF-Wert von 0.02 sr^{-1} , beginnend bei einem Winkelabstand von 10° vom direkten Reflex.

NIST3 : Reflektionsstandard (40GNOPOL) des NIST. Diese Probe weist wie die *Spectralon*-Proben eine *Lambertsche* Streucharakteristik auf. Entsprechend den Referenzmessungen des NIST liegt der BRDF Wert bei 0.02 sr^{-1} .

Als **radiometrisches Referenzmeßsystem** wird das Strahlungsmeßgerät IL1700 der Fa. International Light mit verschiedenen kalibrierten Detektorköpfen verwendet. Das Meßgerät erlaubt eine radiometrische Leistungsmessung über mehr als 10 Dekaden und kann mit Hilfe einer spektralen Kalibrierung des Detektorkopfes auch für die Messung bei unterschiedlichen Lichtwellenlängen eingesetzt werden.

Sowohl bei der Kalibrierung der Faserpositionen als auch für die Bestimmung der Korrekturwerte ist zu beachten, daß die Kalibrierung mit der Beleuchtungsquelle durchzuführen ist, die auch für die anschließenden Messungen verwendet werden soll. Diese Einschränkung ist aufgrund der starken Wellenlängenabhängigkeit der Abbildungsoptik und der Quanteneffizienz des Detektors notwendig. Daher ist nach jedem Wechsel der Beleuchtungsquelle eine erneute Kalibrierung notwendig.

Zunächst stellt sich die Frage, wie groß die Abweichungen vor und nach einer radiometrischen Kalibrierung in den einzelnen Sensorarmen sind. Hierfür wurden entsprechende

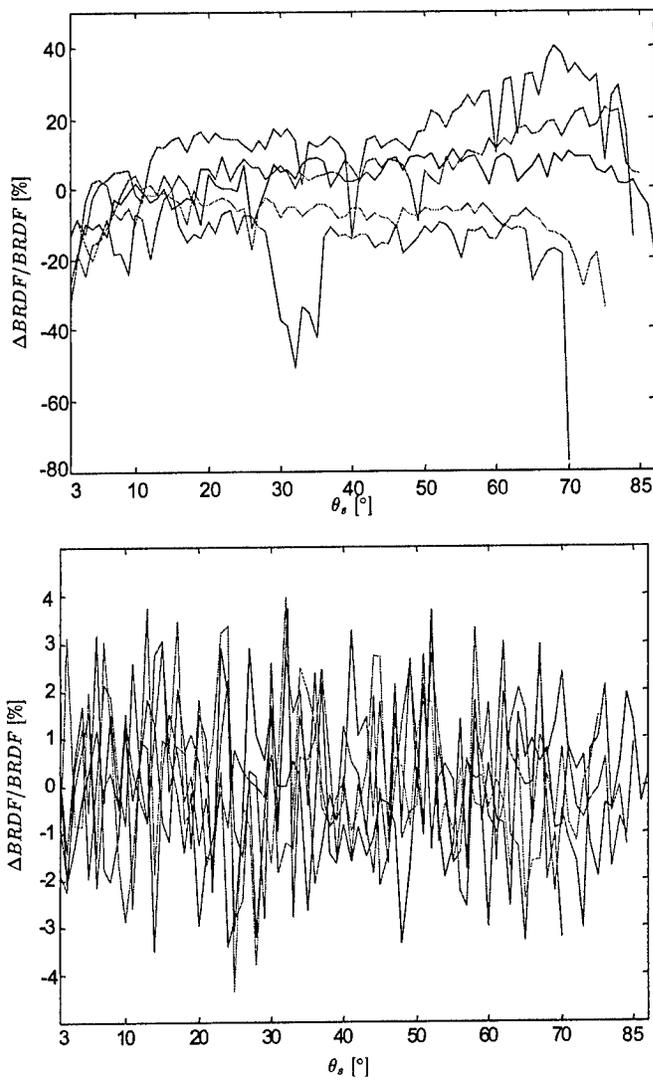


Abbildung 7.1: Kalibrierung des faseroptischen Streulichtsenors; oben: relative Abweichung des Intensitätsverlaufs nach Positionskalibrierung, unten: relative Abweichung des Strahlungsleistungsverlaufs nach Hellsignal-, Dunkelsignalkorrektur und radiometrischer Anbindung. Die einzelnen Sensorarme sind durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet.

Kalibriermessungen mit einer fünfarmigen Sensorkopfkonfiguration und den folgenden Meßparametern durchgeführt. Als Beleuchtungsquelle wurde die in Tabelle 5.1 aufgeführte Beleuchtungskonfiguration ($\lambda = 670\text{nm}$, $f' = 88\text{mm}$, SK9716) mit einer optischen Strahlungsleistung¹ von 1 mW verwendet. Die Kamera wurde für die Kalibrierung mit einer konstanten Integrationszeit von 10 ms beaufschlagt und für die Faserumgebung wurden 20 Pixel zugelassen. Als Referenzoberfläche für die Bestimmung der k_s Korrekturfaktoren wurde der Reflexionsstandard SRS99 verwendet. Für die Berechnung der Hellsignalkorrekturwerte k_s wird die einfallende Strahlungsleistung nach dem *Lambertschen* Kosinusetz für die einzelnen Streuwinkel θ_s korrigiert, und unter Berücksichtigung der Reflektivität der Oberfläche als Φ_s in die nach k_s umgestellte Gleichung 5.12 eingesetzt. In Abbildung 7.1 sind die Intensitätsverteilungen über den einzelnen Sensorarmen vor und nach der radiometrischen Kalibrierung dargestellt. Vergleicht man die Intensitätsabweichungen vor und nach der Kalibrierung, läßt sich eine deutliche Verbesserung erkennen. Vor der Kalibrierung liegt die relative Abweichung vom Nominalwert im Bereich von -80% bis +40% und nach der Kalibrierung im Bereich von -4% bis +4%.

Führt man nun Streulichtmessungen an Oberflächen mit bekannten Streulichtverteilungen durch, ist eine **Verifikation** der berechneten Korrekturgrößen möglich. Dementsprechend wurden Verifikationsmessungen an den genannten Streulichtstandards vorgenommen. In Abbildung 7.2 sind die Meßergebnisse für einen Sensorarm und einen Einfallswinkel von $\theta_i = 40^\circ$ dargestellt. Vergleicht man die *Spectralon*-Messungen mit Referenzmessungen aus der Literatur [50, 85], ist eine gute Übereinstimmung in den Absolutwerten der BRDF als auch in deren winkelabhängigem Verlauf zu erkennen. Das weiße *Spectralon* (SRS99) zeigt demnach einen deutlichen Abfall im Bereich der hohen Streuwinkel, wogegen das schwarze *Spectralon* (SRS02) eine nahezu kontinuierlich ansteigende Streuung mit zunehmendem Streuwinkel aufweist. Der Reflexionsstandard NIST3 zeigt das gleiche Verhalten wie das schwarze *Spectralon* und entspricht damit ebenfalls den Referenzmessungen des NIST. Die Abweichungen von den theoretischen Absolutwerten sind im direkten Reflex ($\theta_s = 40^\circ$) am geringsten und liegen hier unterhalb von 15%. Die Reflexionsstandards NIST1 und NIST2 werden ebenfalls mit Referenzmessungen des NIST verglichen und weisen aufgrund der Messung mit unterschiedlichem Einfallswinkel eine Verzerrung in ihrem Verlauf auf. Ein Vergleich der Plateauwerte muß folglich in unterschiedlichen Winkelbereichen erfolgen, die hierbei festzustellende Abweichung liegt ebenfalls unterhalb von 15% des BRDF-Wertes.

Nachdem das absolut messende Verhalten des faseroptischen Streulichtensors experimentell nachgewiesen ist, stellt sich die Frage nach der Größe der stochastischen Meßfehler. Hierbei sollte, in Streulichtsignalen deren Dynamik innerhalb der Signaldynamik der Kamera liegen und in Signalformen deren Dynamik größer als die Kameradynamik sind, unterschieden werden. Für das Rauschverhalten bei geringer Signaldynamik wurden 100 Wiederholungsmessungen auf dem *Spectralon*-Standard SRS99 durchgeführt. Die Integrationszeit der Kamera betrug 10 ms und die Laserleistung wurde mit 0.013 mW so eingestellt, daß keine Übersteuerung in der Kamera auftrat. Für die Bestimmung des stochastischen Verhaltens, für eine die Kameradynamik überschreitende Signaldynamik, wurde eine polierte Stahlprobe mit einer Laserleistung von 0.12 mW und einem Einfallswinkel von 40° bestrahlt und der direkte Reflex auf einen Wellenleiterarm fokussiert. Als Integrationszeitverfahren wurde das in Kap. 6.2 erläuterte Verfahren mit sechs festen Integrationsstufen (1 ms, 5 ms, 10 ms, 100

¹Mit optischer Strahlungsleistung ist an dieser Stelle die tatsächlich auf die Probe auftreffende Strahlungsleistung bezeichnet.

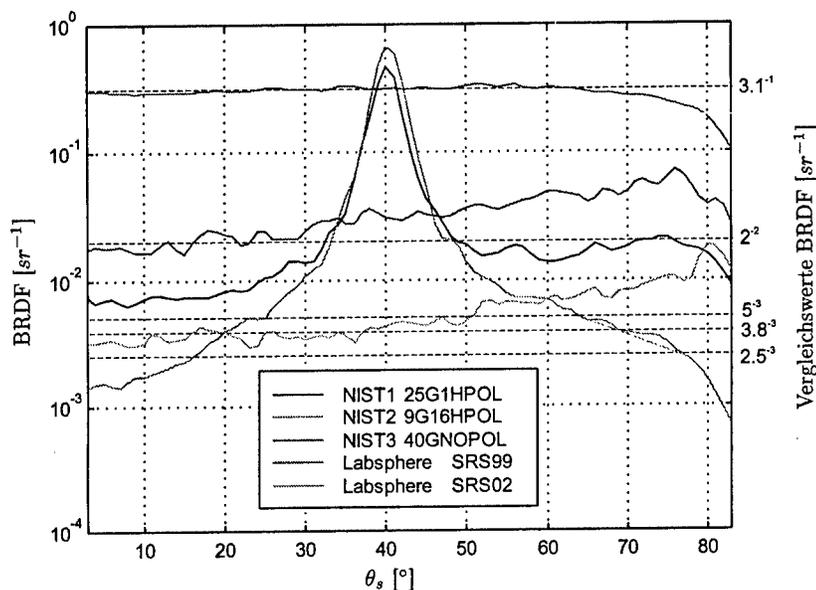


Abbildung 7.2: BRDFs von Streulichtstandards für einen Einfallswinkel von $\theta_i = 40^\circ$, aufgenommen mit dem kalibrierten faseroptischen Streulichtsensor.

ms, 500 ms) eingesetzt. Die Meßergebnisse dieser beiden Experimente sind in Abbildung 7.3 dargestellt. Es ist deutlich die Abhängigkeit des stochastischen Fehlers vom Signalwert zu erkennen. Betrachtet man den relativen stochastischen Fehler, ist dieser bis auf den Anteil um den direkten Reflex konstant und ist für die hochreflektive *Lambertsche* Oberfläche (3%) geringer als für die Stahloberfläche (10%). Der gestiegene Fehler im direkten Reflex ist auf ein Auswandern des Intensitätsmaximums aus der Faserapertur in Abhängigkeit vom Probenort während der Wiederholungsmessungen zurückzuführen.

Schlussfolgernd kann festgestellt werden, daß der faseroptische Streulichtsensor eine radiometrische Messung der BRDF über mehr als 4 Dekaden erlaubt und besonders für die Messung diffus streuender Oberflächen außerhalb des direkten Reflexes geeignet ist. Aufgrund seiner kleinen Faserdurchmesser und dem damit verbundenen geringen Füllfaktor ist der faseroptische Streulichtsensor für eine Messung von Streulichtverteilungen glatter Oberflächen im direkten Reflex nicht geeignet.

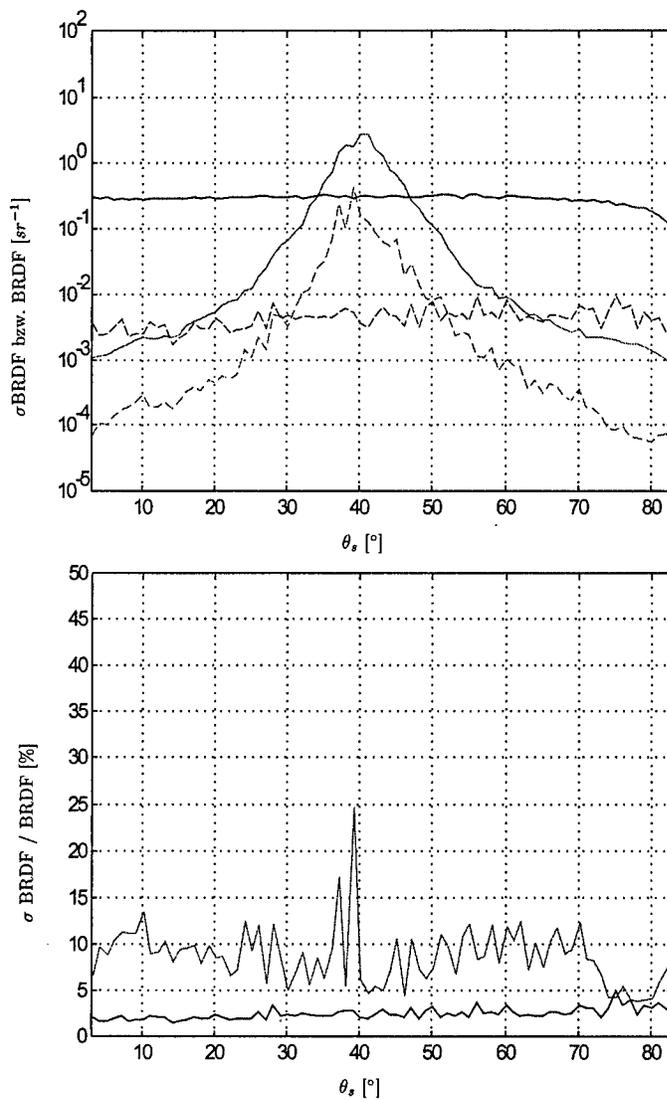


Abbildung 7.3: Stochastisches Verhalten des faseroptischen Streulichtsenors für 100 Wiederholungsmessungen an einer *Lambertschen* Oberfläche und einer spiegelnden Oberfläche. Oben: mittlerer Signalverlauf und Standardabweichung, unten: relativer stochastischer Fehler. Erläuterung der Graphen: rote Graphen = Stahlprobe, blaue Graphen = *Lambertsche* Oberfläche, durchgezogene Linien = Mittelwert über die Wiederholungsmessungen, gestrichelte Linien = Standardabweichung über die Wiederholungsmessungen.

7.2 Kalibrierung des planaren Streulichtensors

Wie bereits in Kap. 5.4.2 erläutert, ist für den planaren Streulichtsensor eine Kennlinienkorrektur für jedes einzelne Pixel notwendig. Der für die Kennlinienaufnahme verwendete Aufbau ist in Abb. 7.4 skizziert. Um die volle Dynamik des Sensors ausnutzen zu können, ist es notwendig, während der Kennlinienaufnahme einen Bereich von mehr als sechs Dekaden Bestrahlungsstärke zu durchfahren. Hierfür wurde ein 150 mW Halbleiter-Laser in Verbindung mit verschiedenen Kombinationen von Strahlabschwächern verwendet. Während der Kalibrierung ist ein örtlich konstantes Strahlprofil über dem Sensor zu gewährleisten, damit eine anschließende Homogenitätskorrektur der Kennlinien möglich ist.

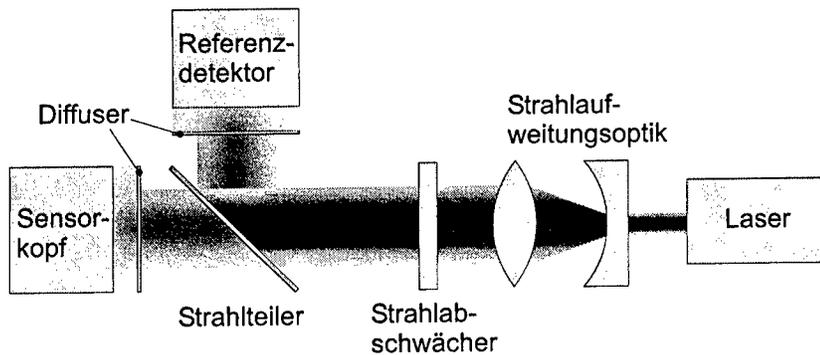


Abbildung 7.4: Skizze des Kalibrierbaus des planaren Streulichtensors.

Im Rahmen der Arbeit wurden verschiedene Kalibrierungen in einem Bereich von $10^{-5} W/m^2$ bis $100 W/m^2$ durchgeführt. Beispielhaft soll an dieser Stelle eine Kalibrierung im Bereich von $2 \cdot 10^{-5} W/m^2$ bis $100 W/m^2$ diskutiert werden. Mit Hilfe von fünf verschiedenen Strahlabschwächerkombinationen und einer Variation der Laserleistung wurde der genannte Kalibrierbereich in 34 Intensitätsabstufungen durchfahren. In Abbildung 7.5 sind die aufgenommenen Kennlinien aller 8013 Pixel zusammenfassend durch mittlere, minimale und maximale Kennlinie dargestellt. Anhand der minimalen und maximalen Kennlinie ist zu erkennen, daß Bestrahlungsstärken zwischen $10^{-4} W/m^2$ bis $100 W/m^2$ vollständig im Wertebereich des ADC von 0 bis 4095 LSB liegen und sich ein Anstieg von ca. 450 LSB pro Dekade Bestrahlungsstärke ergibt. Das maximale FPN, welches durch die Differenz zwischen maximaler und minimaler Kennlinie bestimmt ist, beträgt ca. 1500 LSB und unterstreicht damit die Notwendigkeit einer pixelweisen Korrektur dieser systematischen Fehlerkomponente. Die bereits in Abschnitt 5.12 aufgezeigten Nichtlinearitäten bezüglich der logarithmierten Bestrahlungsstärken sind in abgeschwächter Form auch in den gemittelten Kennlinien wiederzufinden. Um eine möglichst kompakte Repräsentation der Korrekturwerte zu erhalten, wurde versucht, die einzelnen Detektorkennlinien parametrisch zu beschreiben. Ziel ist es hierbei, die Approximationsfehler zwischen den parametrischen Darstellungen und den gemessenen Kennlinien möglichst gering zu halten und dabei eine Darstellungsform zu wählen,

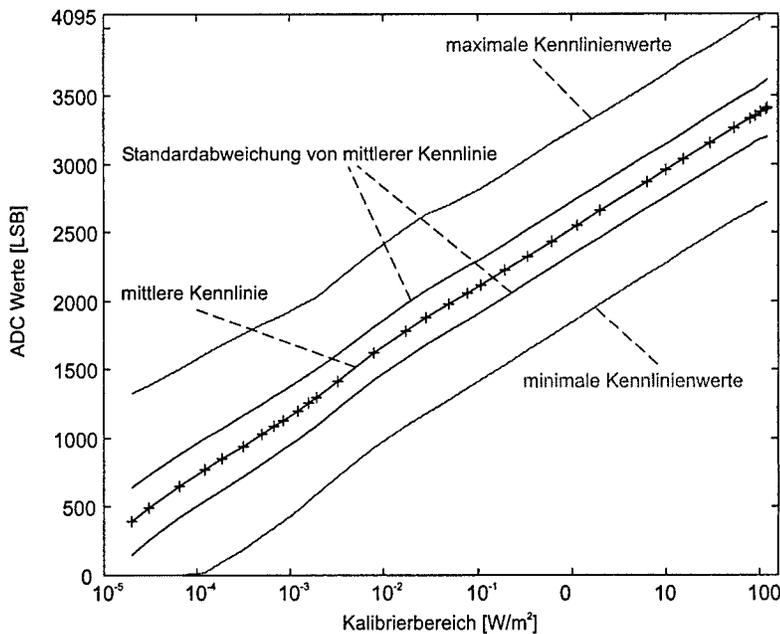


Abbildung 7.5: Zusammengefaßte Darstellung der Detektorkennlinien aller Pixel.

die eine Meßwertkorrektur in Echtzeit² zuläßt. Als Approximationsfunktionen wurden eine lineare Funktion und ein Polynom dritten Grades angesetzt. Abbildung 7.6 zeigt die Verteilung der Kennlinienapproximationsfehler über der Sensorfläche für die beiden Approximationsansätze. Beide Fehlerverteilungen weisen erhöhte Abweichungen um den Mittelpunkt des Sensors und entlang einer spiralförmigen Linie, welche Pixel mit einer kleineren Fläche kennzeichnet, auf. Somit kann festgestellt werden, daß mit abnehmender Pixelfläche die Kennlinienabweichungen von der ideal linearen Kennlinie zunehmen und damit auch das Approximationsergebnis schlechter wird. Bezieht man die Fehler (120 LSB) im Sensormittelpunkt auf den mittleren Wertebereich einer Dekade (450 LSB), ergibt sich ein relativer Approximationsfehler von mehr als 26%, der damit deutlich zu hoch ist. Daher wurde letztlich für die Meßwertkorrektur ein anderer Ansatz gewählt. Hierbei wird analog zu einer Splineapproximation mit linearen Teilfunktionen der komplette Kalibriersatz in Form einer Look-Up-Tabelle abgelegt und die Werte zwischen den Kalibrierstützstellen werden linear interpoliert. Vorteile dieses Verfahrens sind, daß es den Kalibriersatz an seinen Stützstellen fehlerfrei repräsentiert und bei entsprechender Auslegung der Look-Up-Tabelle eine echtzeitfähige Korrektur ermöglicht. Nachteilig gegenüber der Approximation mit einer einzelnen Funktion ist der hohe Speicherbedarf infolge der vielen Stützstellen der Teilfunktionen.

²Echtzeitfähigkeit bedeutet in diesem Zusammenhang, daß die Korrektur in weniger als einer Meßwertaufnahmeperiode erfolgt, d.h. bei Ausnutzung der maximalen Auslesegeschwindigkeit von 500kHz stehen $2\mu s$ pro Pixel für die Meßwertkorrektur zu Verfügung.

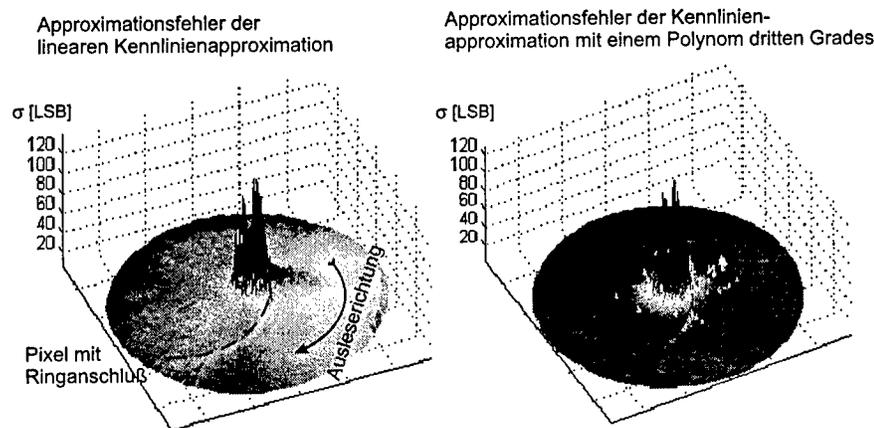


Abbildung 7.6: Verteilungen der Kennlinienapproximationsfehler über der Sensorfläche.

Neben der Untersuchung der systematischen Fehler ist das Rauschverhalten des Sensors zu analysieren. Von besonderem Interesse ist hierbei, inwieweit eine Abhängigkeit des Rauschens vom Signalpegel und/oder der Pixelposition vorhanden ist. Für diese Untersuchung wurden während der Kennlinienkalibrierung für jede Bestrahlungsstufe zehn Wiederholungsmessungen durchgeführt und anschließend die Standardabweichungen für jeden Pixel und jede Bestrahlungsstufe über die Meßwiederholungen berechnet. Abbildung 7.7 zeigt die resultierende Matrix der stochastischen Fehleranteile in Abhängigkeit von Pixelindex und Bestrahlungsstärke. Es sind keine systematischen Abhängigkeiten des stochastischen Fehlers von Bestrahlungsstärke oder Pixelposition zu beobachten. Im Bereich der Grenzen des Kalibrierbereiches sind besonders bei den flächenmäßig kleinen Pixeln Signalsättigungsercheinungen bzw. Signalbegrenzungsercheinungen zu beobachten. Eine weitere Erhöhung des Rauschens ist zwischen 0.001 W/m^2 und 0.01 W/m^2 zu beobachten. Diese Erscheinung ist auf eine steilere Kennlinie der Photodioden in diesem Bestrahlungsbereich zurückzuführen, wodurch wiederum der Zeitpunkt des Auslesens der Photodioden einen stärkeren Einfluß auf die Sensorantwort hat und somit zeitliche Schwankungen des softwaregesteuerten Auslesens zu einem erhöhten Rauschanteil führen. Wird der Sensor im Bereich von 10^{-4} W/m^2 bis 100 W/m^2 betrieben, wird der erhöhte stochastische Fehler an den Kalibriergrenzen aus dem Meßbereich ausgeschlossen und der mittlere stochastische Fehler liegt im Mittel unter 7 LSB. Dieser Wert entspricht einem relativen Fehler von weniger als 1% bezogen auf die Bestrahlungsstärke.

Infolge der Verwendung einer Laserlichtquelle zur Beleuchtung des Detektors während der Kalibrierung, ist das typischerweise gaußförmige Strahlprofil in den Kennlinien der Photodioden enthalten, so daß eine ortsabhängige Korrektur der Bestrahlungsstärken des Kalibriersatzes erforderlich ist. Als Referenzmessungen für eine homogene Ausleuchtung des gesamten Detektors wurden mehrere Tageslichtmessungen mit vorgeschalteten Diffusern unterschiedlicher Transmission durchgeführt. Der Kennlinienausgleich erfolgte, indem die

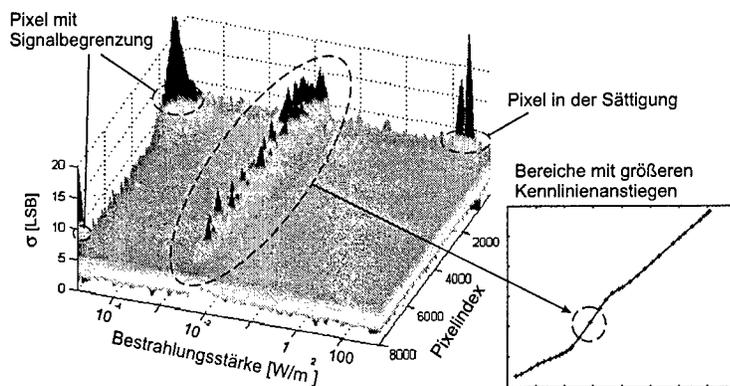


Abbildung 7.7: Das stochastische Verhalten des planaren Streulichtensors in Abhängigkeit von Einzeldetektorindex und Bestrahlungsstärke.

Tageslichtmessungen zunächst nach dem oben beschriebenen Verfahren korrigiert wurden; resultierend erhält man Messungen, in denen das ursprüngliche Strahlprofil der Kalibrierung enthalten ist. Bezieht man nun die einzelnen Messungen auf ihren Mittelwert, erhält man einen vom Meßwert unabhängigen relativen Fehler. Um ein robusteres Korrekturergebnis zu erreichen, wurden die einzelnen ortsabhängigen Fehler über die verschiedenen Tageslichtmessungen gemittelt. Mit Hilfe dieses Korrekturdatensatzes wurden anschließend die Bestrahlungsstärken der einzelnen Kennlinien im Kalibriersatz pixelweise korrigiert. In diesem Zusammenhang wurde ebenfalls versucht, den relativen Fehler durch eine Gaußglocke zu approximieren, um damit ein robusteres Korrekturergebnis zu erreichen. Allerdings hat sich gezeigt, daß neben dem Laserstrahlprofil andere systematische Abweichungen³ in dem Kalibrierdatensatz enthalten sind, welche sich nicht durch eine Gaußglockenfunktion beschreiben lassen, und somit die Approximation zu einem schlechteren Ergebnis als die oben beschriebene direkte Korrektur führt. In Abbildung 7.8 sind eine Tageslichtmessung und der gemittelte Korrekturdatensatz dargestellt.

Mit Hilfe des korrigierten Kalibrierdatensatzes ist nun ein absolutes Messen der BRDF mit dem planaren Streulichtsensor möglich. Eine entsprechende Verifikation dieser Fähigkeit erfolgt mit den bereits vorgestellten Streulichtstandards. In Abbildung 7.9 sind die BRDFs der Streulichtstandards dargestellt. Für die Messungen wurde ein Einfallswinkel von 20° verwendet und ein Winkelbereich von 16° um den direkten Reflex herum abgetastet. Die Abweichungen der Meßwerte von den Nominalwerten der Standards liegen im Mittel bei ca. 6% und sind im direkten Reflex zwischen -2° und $+2^\circ$ etwas höher. Diese Erhöhung der Meßabweichung ist auf Speckles zurückzuführen, welche aufgrund der kleineren Pixelflächen in diesem Detektorbereich einen größeren Einfluß haben.

³Abweichungen, die auf Reflexionen und Streuerscheinungen an den Kanten des zur Kalibrierung verwendeten Strahlteilers zurückzuführen sind.

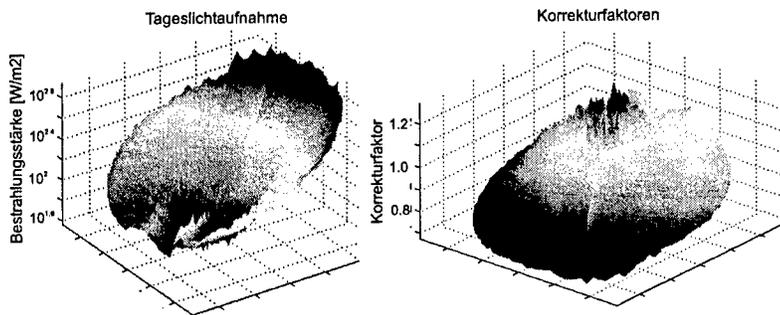


Abbildung 7.8: Korrektur der systematischen Abweichungen im Kalibrierdatensatz; links: eine Tageslichtaufnahme mit vorgeschaltetem Diffuser zeigt die systematische Abweichung im Kalibrierdatensatz, rechts: die aus mehreren Tageslichtaufnahmen berechneten Korrekturwerte.

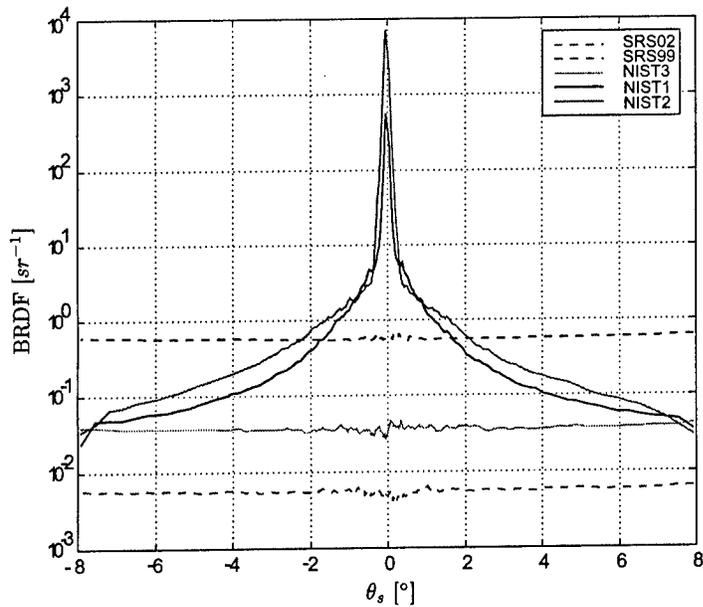


Abbildung 7.9: BRDFs von Streulichtstandards für einen Einfallswinkel von $\theta_i = 20^\circ$, aufgenommen mit dem kalibrierten planaren Streulichtsensor.

7.3 Vergleich von Topographie- und Streulichtmessungen an glatten Oberflächen

Die Möglichkeit der Messung von Oberflächenkenngrößen mit den realisierten Streulichtsensoren soll mit Hilfe eines Vergleichs der Streulichtmessungen mit topographischen AFM-Messungen nachgewiesen werden. Der Vergleich basiert auf der in Abschnitt 4.3 erläuterten RR-Theorie und wird anhand der PSD und der quadratischen Mittenrauheit R_q durchgeführt. Als **Proben** werden fünfzehn polierte Stahloberflächen in einem Rauheitsbereich von $R_q = 5$ nm bis 80 nm verwendet, s. Anhang B. Die Probenoberflächen wurden zunächst mehreren Schleifgängen unterzogen und anschließend in bis zu sechs Polierschritten mit variierender Polierkraft, Polierzeit und Korngröße beaufschlagt.

Der betrachtete Probenausschnitt wird für die Streulichtmessung durch den Spotdurchmesser von ca. 0.7 mm auf der Oberfläche bestimmt. Für die AFM-Topographiemessungen wird der Probenausschnitt durch den maximalen Meßbereich des AFMs von $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ begrenzt. Eine Erhöhung des AFM-Meßbereiches ist über das Zusammensetzen von aneinandergrenzenden AFM-Einzelmessungen möglich [75]. Für eine vollständige Überdeckung von Streulicht und AFM-Messung wären hierfür 49 Einzelmessungen für jede Probenoberfläche notwendig. Aufgrund des daraus resultierenden Zeitaufwandes und der riesigen Datenmenge wurden AFM-Einzelmessungen von $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ verwendet und nur der überlappende Ortsfrequenzbereich von AFM und Streulicht verglichen.

Für die Streulichtmessung mit dem planaren Streulichtsensor wurde ein Einfallswinkel von $\theta_i = 36^\circ$ verwendet und um den direkten Reflex in einem Abstand von Detektormittelpunkt zu Beleuchtungsfleckmittelpunkt von $R_0 = 20$ mm gemessen. Bei Verwendung des gesamten Detektors ergibt sich damit ein abgetasteter Winkelbereich von 23.6° . Mit Hilfe der RR-Streulichttheorie sollen aus den gemessenen Streulichtverteilungen jeder Stahlprobe die zweidimensionalen PSDs berechnet werden. Unter Annahme einer isotropen Oberfläche ist ein graphischer Vergleich der PSD-Verläufe anhand von PSD-Schnitten durch die zweidimensionalen PSDs möglich. Hierbei ist es sinnvoll, die radiale Ortsfrequenz f_r nach Gl. 7.1 als unabhängige Variable zu verwenden.

$$f_r = \sqrt{f_x^2 + f_y^2} \quad (7.1)$$

Die Werte der quadratischen Mittenrauheit R_q werden anschließend, gemäß Gl. 4.11, unter Vorgabe einer Bandbreite durch Integration der PSD berechnet.

In Abbildung 7.10 ist jeweils ein Schnitt durch die berechnete Streulicht-PSD und die berechnete AFM-PSD der Probe A1 dargestellt. Auffällig sind die unterschiedlichen Bandbegrenzungen der beiden Meßgeräte, für die Streulicht-PSDs 0.0013 - $0.32 \mu\text{m}^{-1}$ und für die AFM-PSDs 0.02 - $5 \mu\text{m}^{-1}$ (nur bis $2.5 \mu\text{m}^{-1}$ dargestellt). Im Bereich der kleinen Ortsfrequenzen (links von f_u) weist die AFM-PSD einen deutlichen Einbruch aufgrund des verwendeten Detrendingverfahrens auf, wogegen bei der Streulicht-PSD eine kontinuierlichere und gleichmäßigere Abtastung der kleinen Ortsfrequenzen zu erkennen ist. Betrachtet man die hohen Ortsfrequenzen, weist das AFM eine wesentlich größere Bandbreite als der Streulichtsensor auf. Die mit dem Streulichtsensor nach der Gittergleichung 4.29 kleinste meßbare Ortsfrequenz ⁴ liegt bei $0.602 \mu\text{m}^{-1}$ für die verwendete Laserlichtwellenlänge von $\lambda = 681$

⁴Hierfür muß der Detektor so verschoben werden, daß der äußere Detektorring einem Streuwinkel von 90° entspricht.

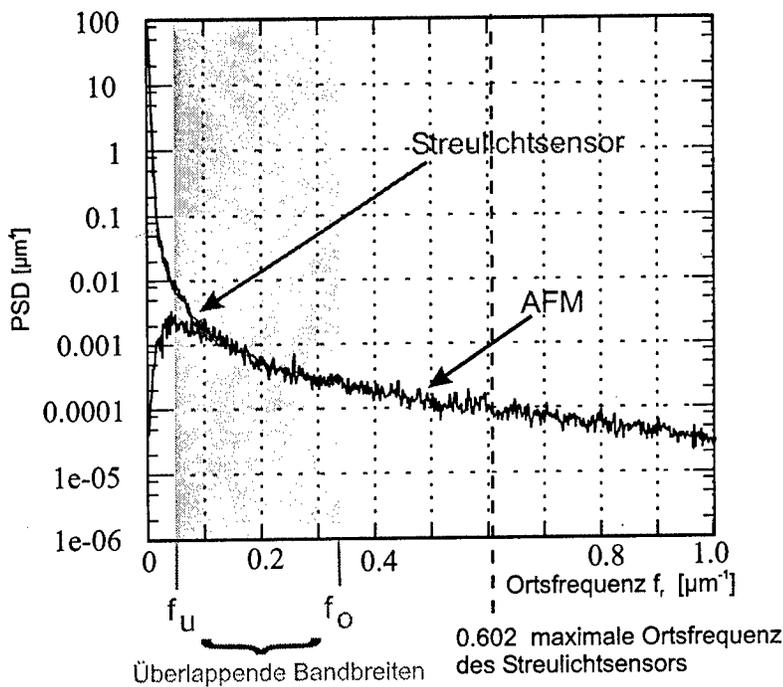


Abbildung 7.10: PSDs der Streulichtmessungen und der Topographiemessungen für eine Stahl-oberfläche.

nm. Innerhalb der gekennzeichneten Bandbreite $f_u - f_o$ liegen die beiden PSD-Schnitte übereinander. Hierbei wird die Problematik der Wahl der Bandbegrenzung und insbesondere die der unteren Bandbegrenzung f_u deutlich. Ein Kriterium, welches zur Festlegung der unteren Bandbegrenzung verwendet werden kann, ist die bandbegrenzte quadratische Mittenrauheit R_q . Demnach ist die Bandbegrenzung so festzulegen, daß R_q aus der bandbegrenzten Streulicht-PSD und der bandbegrenzten AFM-PSD möglichst gut übereinstimmen. Abbildung 7.11 zeigt die bandbegrenzten Rauheitswerte für eine AFM-Messung und eine Streulicht-Messung in Abhängigkeit von der unteren Bandbegrenzung. Als obere Bandbegrenzung wurde die maximale Ortsfrequenz des Streulichtensors von $0.32 \mu\text{m}^{-1}$ verwendet. Vergleicht man den Verlauf der R_q -Kurven des AFMs und der Streulichtmessung, ist eine gute Übereinstimmung im Ortsfrequenzbereich f_r zwischen 0.3 und $0.05 \mu\text{m}^{-1}$ festzustellen, d.h. in diesem Bereich enthalten beide Messungen die gleichen spektralen Rauheitsanteile. Ferner ist zu beobachten, daß unterhalb einer Ortsfrequenz von $0.05 \mu\text{m}^{-1}$ der spektrale Rauheitsanteil der Streulichtmessung stark ansteigt. Gleiches ist auch bei den AFM-Messungen in Abhängigkeit von dem gewählten Detrendingverfahren und der damit verursachten Bandbegrenzung zu beobachten. Dieser Umstand verdeutlicht die starke Abhängigkeit des Rauheitsparameters R_q von der unteren Bandbegrenzung f_u infolge der mit

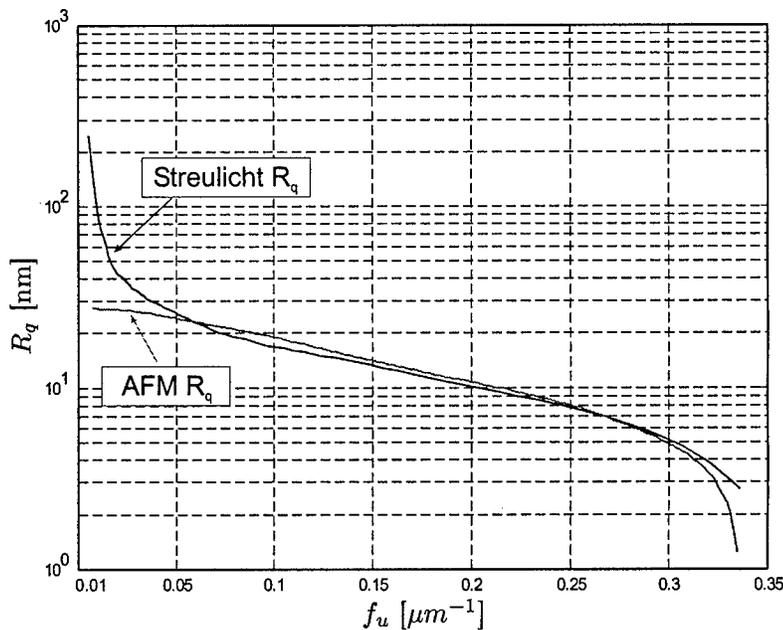


Abbildung 7.11: R_q der Streulichtmessungen und der Topographiemessungen für eine Stahloberfläche in Abhängigkeit von der unteren Bandbegrenzung f_u . Die obere Bandbegrenzung ist konstant mit $f_o = 0.33 \mu\text{m}^{-1}$.

abnehmender Ortsfrequenz f_r , ansteigenden spektralen Leistungsanteile der PSD, s. auch Abb. 7.10.

Nachdem die PSDs und die Rauheiten der Streulicht- und AFM-Messungen anhand von PSD-Schnitten einer Probe verglichen wurden, soll im folgenden der Vergleich für alle fünfzehn Proben über jeweils die gesamte PSD erfolgen. Als Vergleichswert dient wieder die quadratische Mittenrauheit R_q . Hierbei stellt sich die Frage nach einer einheitlichen Wahl der Bandbegrenzung für alle Messungen. Die obere Bandbegrenzung f_o wurde mit $0.3 \mu\text{m}^{-1}$ so gewählt, daß sie in allen radialen Richtungen vom Streulichtsensor noch vollständig erfaßt wird. Zur Bestimmung der unteren Bandbegrenzung f_u wurde diese schrittweise von $0.1 \mu\text{m}^{-1}$ bis $0.02 \mu\text{m}^{-1}$ verkleinert und für jede Bandbegrenzung die Rauheit R_q sowohl für die Streulichtmessung als auch für die AFM-Messungen bandbegrenzt aus den PSDs berechnet. Die sich daraus ergebenden Zusammenhänge zwischen Streulichtrauheitswerten und AFM-Rauheitswerten sind in Abbildung 7.12 für verschiedene f_u dargestellt. Um eine quantitative Aussage über die Qualität der Übereinstimmung der Rauheitswerte machen zu können, wurden die Korrelationskoeffizienten zwischen Streulichtrauheitswerten und AFM-Rauheitswerten für die einzelnen f_u berechnet. Aus den Korrelationskoeffizienten der R_q -Meßreihen bei unterschiedlicher unterer Bandbegrenzung ist zu erkennen, daß die beste Übereinstimmung zwischen AFM- und Streulicht-Rauheit bei einer unteren Bandbegren-

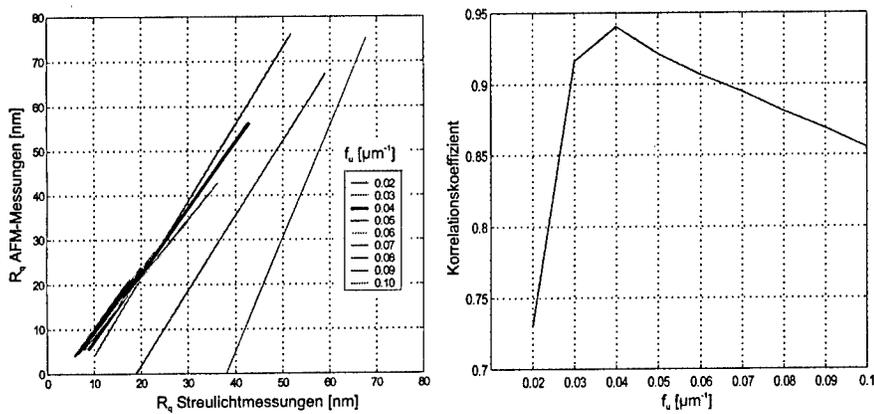


Abbildung 7.12: Links: R_q der Streulichtmessungen und der Topographiemessungen für alle Stahloberflächen in Abhängigkeit von der unteren Bandbegrenzung f_u . Rechts: Korrelationskoeffizient zwischen Topographie- R_q und Streulicht- R_q für unterschiedliche Bandbegrenzungen.

zung von $0,04\mu\text{m}^{-1}$ vorhanden ist, siehe rechten Teil der Abbildung 7.12. Bei Verwendung der genannten Bandbegrenzung ergibt sich ein Korrelationskoeffizient von $R = 0,94$ und ein Standardfehler von 6 nm. Der statistische Test auf lineare Korrelation, s. Gl. 7.2, zwischen den Rauheitswerten der Streulichtmessungen und denen der AFM-Messungen, liefert eine eindeutige Signifikanz bei einem Signifikanzniveau von 99.9% und unter Verwendung des Quantils $t_{N-2;1-\frac{\alpha}{2}}$ der t -Verteilung.

$$H_0 = \text{"kein linearer Zusammenhang"} \text{ wird abgelehnt, wenn } TS \geq t_{N-2;1-\frac{\alpha}{2}} \quad (7.2)$$

$$TS = \frac{|R| \cdot \sqrt{N-2}}{\sqrt{1-R^2}} \quad TS = 9.93 \quad t_{N-2;1-\frac{\alpha}{2}} = 4.22 \quad \text{für } R = 0.94, N = 15, \alpha = 0.1\%$$

Somit konnte nachgewiesen werden, daß mit dem planaren Streulichtsensor im Bereich der Gültigkeit der *Rayleigh-Rice*-Theorie und unter Beachtung der Bandbegrenzung ein absolutes Messen der spektralen Leistungsdichtefunktion und damit auch der quadratischen Mittenrauheit möglich ist.

Eine zweidimensionale Darstellung der bandbegrenzten Ausschnitte aus der AFM-PSD und der Streulicht-PSD von $0,04\mu\text{m}^{-1}$ bis $0,3\mu\text{m}^{-1}$ der Probe B1 sind in Abbildung 7.13 zu sehen. Die infolge des Schleifprozesses vorhandenen anisotropen Strukturen sind in beiden PSDs zu erkennen. Hierbei wird die besondere Eignung der Streulichtmethode zur Messung der PSD deutlich. Gegenüber der aus der AFM-Messung berechneten PSD weist die Streulicht-PSD ein deutlich besseres Auflösungsvermögen der betrachteten Ortsfrequenzen auf. Dieses ist vor allem auf die bessere Abstützung der Ortsfrequenzen beim planaren Streulichtsensor in dem betrachteten Frequenzbereich und die nahezu direkte⁵ Messung der PSD bei der Streulichtmethode zurückzuführen.

⁵Die PSD ist bis auf den winkelabhängigen optischen Faktor Q proportional zu der vom Streulichtsensor gemessenen BRDF.

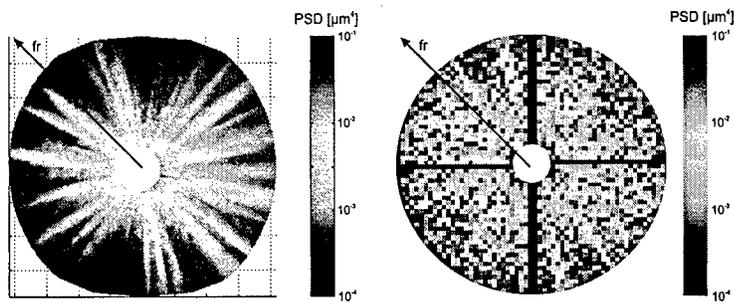


Abbildung 7.13: 2D-PSDs einer Streulichtmessung (links) und einer AFM-Messungen (rechts) der Probe B2 und einer Bandbegrenzung von $0.04\mu\text{m}^{-1} - 0.3\mu\text{m}^{-1}$.

7.4 Rasterscans zur Detektion von Partikeln

Die Defektdetektion auf Oberflächen stellt neben der Charakterisierung der Oberflächentopographie ein typisches Anwendungsgebiet der Streulichtmeßtechnik dar. Um die Eignung der realisierten Streulichtsensoren zur Defektdetektion experimentell nachzuweisen, wurden Messungen zur Bestimmung der kleinsten detektierbaren Defektgröße durchgeführt. Dafür wurde auf eine aus der Halbleiterindustrie bekannte Meßmethode zur Charakterisierung von Defektdetektionssystemen zurückgegriffen. Hierbei werden Kugeln verschiedener Durchmesser aus Polystyrenlatex (PSL) auf einer polierten Wafervorderseite deponiert und das Meßverhalten des Detektionssystems untersucht.

Für die Messungen standen Kugeldurchmesser von 55 nm, 100 nm, 150 nm, 208 nm, 309 nm, 400 nm und $9.8\ \mu\text{m}$ zur Verfügung, wobei mehrere tausend PSL-Kugeln eines Durchmessers in separaten Bereichen auf einem Wafer deponiert wurden. Für das Auffinden dieser Häufungsbereiche von Kugeln auf den Waferoberflächen standen Referenzmessungen der Fa. *ADE Optical Systems Corp.* zur Verfügung. Da es mit dem verwendeten Meßaufbau nicht möglich ist, den Wafer so genau zu positionieren, daß einzelne PSL-Kugeln definiert im Bereich weniger Nanometer angefahren werden können, wurden die einzelnen PSL-Kugelbereiche mit dem Streulichtsensor automatisch abgerastert. Die Rasterschrittweiten in X- und Y-Richtung wurden gleich groß gewählt und an den Durchmesser des Beleuchtungsflecks so angepaßt, daß eine mehrfache Überdeckung der Oberfläche gewährleistet wurde, s. Abb. 7.14. Dadurch ergibt sich im Rasterbild selbst für kleinste Defekte eine Verschmierung des Detektionssignals über mehrere Positionsschritte, wodurch eine reproduzierbare Aussage über das Vorhandensein eines Defektes gewährleistet wird. Um den Aufwand zur Datenspeicherung und Nachbearbeitung zu reduzieren wurde nach jedem Rasterschritt die Streulichtmessung auf einen Parameter reduziert und abgespeichert. Als Parameter wird der Mittelwert aller Einzeldetektormesswerte verwendet, welcher der mittleren Bestrahlungsstärke innerhalb des vom Detektor erfaßten Raumwinkelbereichs entspricht. Für die Messungen wurde eine Detektorposition von $\theta_0 = 50^\circ$, $\phi_0 = 180^\circ$, $R_0 = 20\ \text{mm}$ und ein Einfallswinkel von $\theta_i = 3^\circ$ gewählt, s. Abb. 7.14. Der Detektor überdeckt somit einen Winkelbereich von $\pm 12^\circ$ in Richtung des Azimutwinkels und in Richtung des Streuwinkels. Mit dieser An-

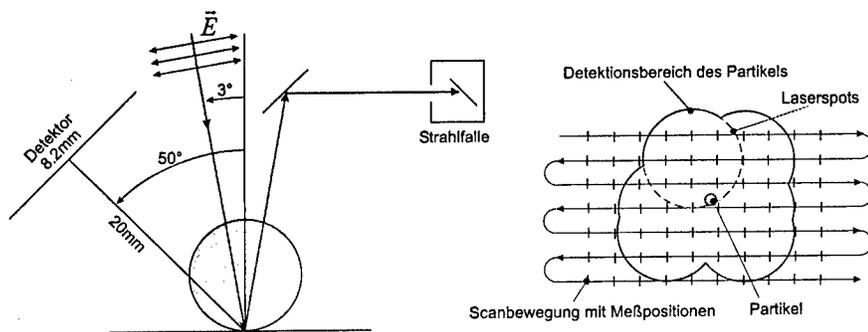


Abbildung 7.14: Die zur PSL-Kugeldetektion verwendete Meßanordnung (links). Veranschaulichung der Erhöhung des Detektionsbereichs durch Überabtastung mit einem Bruchteil der Größe des Beleuchtungsflecks (rechts).

ordnung wird gewährleistet, daß möglichst wenig Streulicht aus der Beleuchtungsquelle in den Detektor gelangen kann und genügend Platz zum Auskoppeln des an der Oberfläche reflektierten Beleuchtungsstrahls vorhanden ist. Als Beleuchtungsquelle wurde ein Halbleiterlaser mit einer Wellenlänge von $\lambda=635$ nm verwendet, wobei alle Partikelmessungen mit p-Polarisation (E-Feld parallel zur Einfallsebene), einem Beleuchtungsfleckdurchmesser von ca. $8 \mu\text{m}$ und einer optischen Leistung von 2.43 mW durchgeführt wurden. In Abbildung

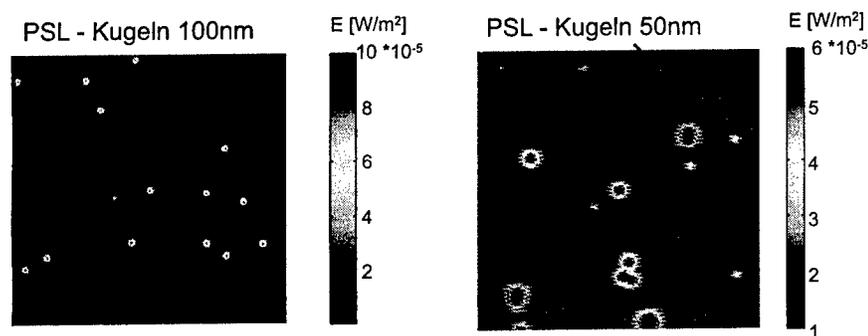


Abbildung 7.15: Messwertbilder von Rasterscans auf einem Testwafer zum Nachweis von PSL-Kugeln, links: $1 \times 1 \text{ mm}^2$ Bereich mit 100 nm PSL-Kugeln, rechts: $0.9 \times 0.9 \text{ mm}^2$ Bereich mit 50 nm PSL-Kugeln und zusätzlichen Partikeln unbestimmter Größe.

7.15 sind die Messwertbilder zweier Rastermessungen über einen Oberflächenbereich mit 100 nm PSL-Kugeln und über einen Bereich mit 50 nm PSL-Kugeln dargestellt. Der mittlere Signalwert der 100 nm Kugeln im linken Messwertbild liegt mit ca. 10^{-4} W/m^2 deutlich über dem Hintergrundsignal und erlaubt eine eindeutige Detektion der Kugeln. Dagegen beträgt

der mittlere Signalwert der 50 nm Kugeln nur ca. $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ W/m}^2$, wodurch eine schlechtere Trennung vom Hintergrundsignal zu erkennen ist. Die im rechten Meßwertbild vorhandenen höheren Defektsignale sind auf Verunreinigungen und größere PSL-Kugeln im abgerasterten Bereich zurückzuführen. Weiterhin ist im Bereich des Übergangs von Hintergrundsignal zu Defektsignal ein zeilenweiser Versatz im Meßwertbild zu beobachten. Dieser Versatz ist in dem in Abschnitt 5.4.2 erläuterten dynamischen Verhalten des Streulichtensors begründet und ist besonders bei sehr geringen Streuleistungen zu beobachten.

Einen Vergleich der gemessenen Streuquerschnitte mit der *Mie*-Theorie (s. Kap. 4.4) zeigt Abbildung 7.16. Die durchgezogene Linie repräsentiert den Streuquerschnitt berechnet nach *Mie* für die oben genannten Parameter des Meßaufbaus in Abhängigkeit vom Kugeldurchmesser. Der den Berechnungen zugrundeliegende Brechungsindex der PSL-Kugeln von $n_p = 1.59$ wurde der Literatur entnommen [61]. Die Meßwerte sind durch Rauten symbolisiert und stellen den Mittelwert aus den Streuquerschnitten der Signalmaxima detektierter Partikel innerhalb der einzelnen Rastermessungen dar. Der Meßwertverlauf zeigt, daß eine Unter-

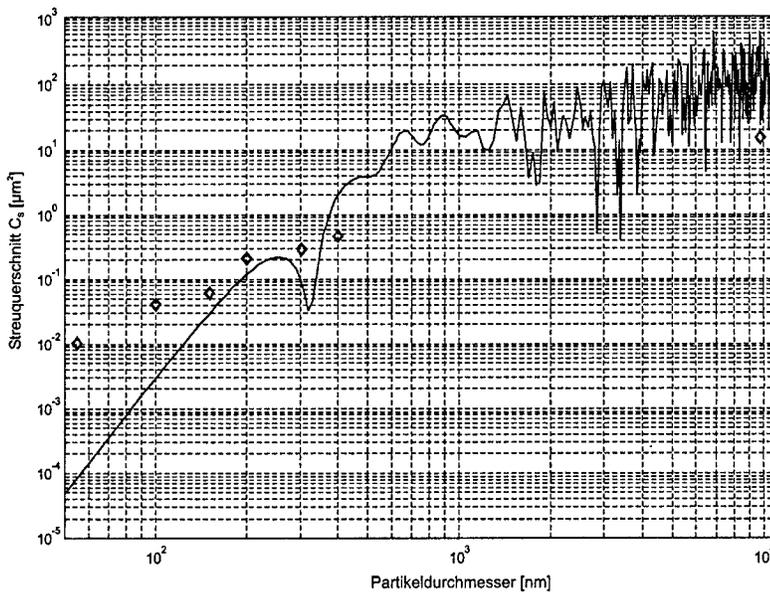


Abbildung 7.16: Vergleich von gemessenen Streuquerschnitten (Rauten) mit nach der *Mie*-Theorie (durchgezogene Linie) berechneten Streuquerschnitten für PSL-Kugeln mit einem Durchmesser von 55 nm bis $9.8 \mu\text{m}$.

scheidung der Partikelgrößen anhand der gemessenen Streuquerschnitte möglich ist, jedoch für kleine Kugeldurchmesser starke Abweichungen der gemessenen Streuquerschnitte von den theoretischen Werten zu verzeichnen sind. Diese Abweichungen sind im wesentlichen darauf zurückzuführen, daß zum einen die Signalwerte unterhalb des kalibrierten Detektionsbereichs liegen und zum anderen die zusätzlich vom Detektor aufgefangene an der Ober-

fläche reflektierte Vorwärtsstreuung der Partikel nicht bei der theoretischen Berechnung des Streuquerschnittes berücksichtigt wurde.

Besonders für eine Charakterisierung und Klassifikation von Defekten mit einer ähnlichen Gesamtstreuung ist die Verwendung des winkelaufgelösten Defektstreusignals notwendig. Beispielhaft hierfür ist in Abbildung 7.17 die winkelaufgelöste Streuverteilung in der Einfallsebene für eine $9.8 \mu\text{m}$ PSL-Kugel auf einem Wafer dargestellt. Die verwendeten Versuchsparameter sind im linken Abbildungsteil skizziert. Im rechten Teil der Abbildung ist ein graphischer Vergleich von der nach *Mie* berechneten Streuverteilung (durchgezogene Linie) mit der gemessenen Streuverteilung (Kreise) dargestellt. Die Positionen von Maxima und

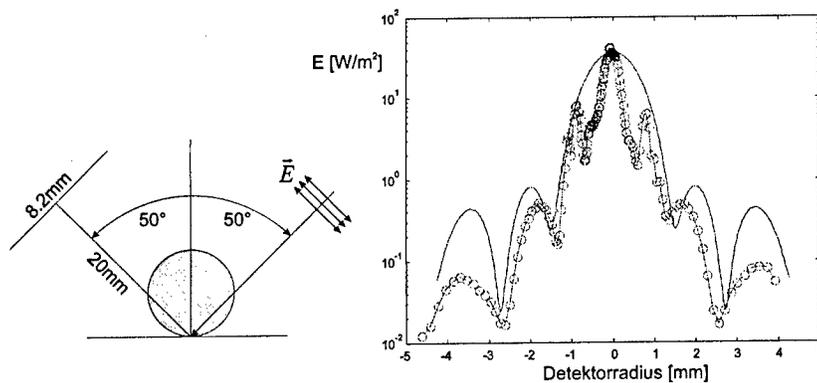


Abbildung 7.17: Vergleich der gemessenen Streulichtverteilung einer $9.8 \mu\text{m}$ PSL-Kugel mit der nach der Mie-Theorie berechneten Streulichtverteilung für p-Polarisation. Links: die verwendete Versuchsanordnung, rechts: Vergleich von Simulation mit Messung anhand der winkelaufgelösten Bestrahlungsstärke in der Einfallsebene.

Minima der gemessenen Streulichtverteilung weichen nur geringfügig von denen der *Mie*-Streulichtverteilung ab. Abweichungen zwischen der theoretischen Streuverteilung und der gemessenen Streuung sind zum einem im Bereich des direkten Reflexes und zum anderen in den Randbereichen der Streuverteilung zu beobachten. Die zusätzlichen Interferenzstrukturen im direkten Reflex der gemessenen Streuverteilung sind auf Wechselwirkungen zwischen Kugelstreuung und der Oberfläche zurückzuführen, welche in dem Berechnungsmodell nicht berücksichtigt sind. Der Intensitätsabfall im Randbereich wird durch das gaußförmige Intensitätsprofil des Beleuchtungsstrahls verursacht. Zwei dreidimensionale Streulichtverteilungen für jeweils eine Partikelmessung im direkten Reflex und eine Partikelmessung außerhalb des direkten Reflexes sind in Abbildung 7.18 veranschaulicht.

Festzuhalten bleibt, daß mit der vorgestellten Versuchsanordnung Partikel mit einer Größe von 50nm detektiert werden konnten und in Form von Rasterkarten sichtbar gemacht wurden. Es hat sich gezeigt, daß die Detektionsgrenze letztlich durch das Verhältnis von praktisch realisierbarer und vor allem auch der Oberflächenstruktur zumutbarer Bestrahlungsstärke und dem vom Detektor meßbaren kleinsten Defektsignal bestimmt ist. Eine

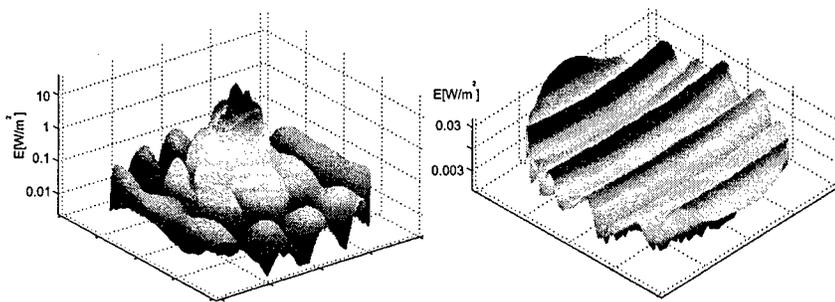


Abbildung 7.18: Streulichtverteilung einer $9.8 \mu m$ PSL-Kugel, links: im direkten Reflex, rechts: außerhalb des direkten Reflexes.

Erhöhung dieses Verhältnisses ist vor allem durch die damit verbundenen Anforderungen an das Gesamtsystem begrenzt, was bedeutet, daß die für den Detektor sichtbare Streuung des optischen Systems unter dem kleinsten meßbaren Defektsignal liegen muß. Bei den vorgestellten Untersuchungen konnte ein Verhältnis von einfallender Bestrahlungsstärke ($2.43 \text{ mW}/50 \mu m^2$) zu kleinstem Defektdetektionssignal ($2.5 \cdot 10^{-5} \text{ W}/m^2$) von $2 \cdot 10^{12}$ realisiert werden.

7.5 Experimenteller Vergleich von Streulichtmerkmalen

In Abschnitt 4.5 wird ein Ansatz zur Auswertung von BRDF-Messungen und zur Lösung des inversen Streuproblems basierend auf Mustererkennung diskutiert. In diesem Zusammenhang werden verschiedene Merkmale zur kompakten Beschreibung von BRDF-Messungen vorgeschlagen. Anliegen dieses Abschnittes ist es, diese Merkmale hinsichtlich ihrer Eignung zur Klassifikation von Oberflächen experimentell zu untersuchen. Als Datensatz hierfür dienen BRDF-Messungen von 11 verschiedenen Oberflächen (im folgenden mit Klassen bezeichnet), aufgenommen mit dem faseroptischen Streulichtsensor, s. Abschnitt 5.3. Die Probenoberflächen wurden so ausgewählt, daß der gesamte Bereich von glatten Proben mit einer ausgeprägten spekularen Komponente bis hin zu Proben mit einer *Lambertschen* Streucharakteristik durch den Datensatz abgedeckt wird. Bei den Proben 1-5 und 11 handelt es sich um verschiedene geschliffene und polierte Stahlproben, die Proben 6-10 entsprechen den in Abschnitt 7.1 erläuterten *Lambertschen* Oberflächen. Zur Auswertung werden die Werte der Streuverteilungen in der Einfallsebene ($\phi_s = 0$) für einen Sensorarm ($\theta_s = 3^\circ \dots 88^\circ$) verwendet und entsprechend Kap. 4.5 die Merkmale berechnet. Der Einfallswinkel θ_i ist für alle Messungen mit 38° gegeben. Um die Variation der Oberflächentopographie einer Probe möglichst gut zu erfassen, wurden von jeder Probe jeweils 100 BRDF-Einzelmessungen an verschiedenen Punkten der Oberfläche durchgeführt. In Abbildung 7.19 sind die 11 Mittelwertkurven, berechnet aus den jeweils 100 Einzelmessungen einer Probe, dargestellt. Der Dynamikbereich der BRDF-Messungen erstreckt sich bis zu sechs Dekaden und ist für die

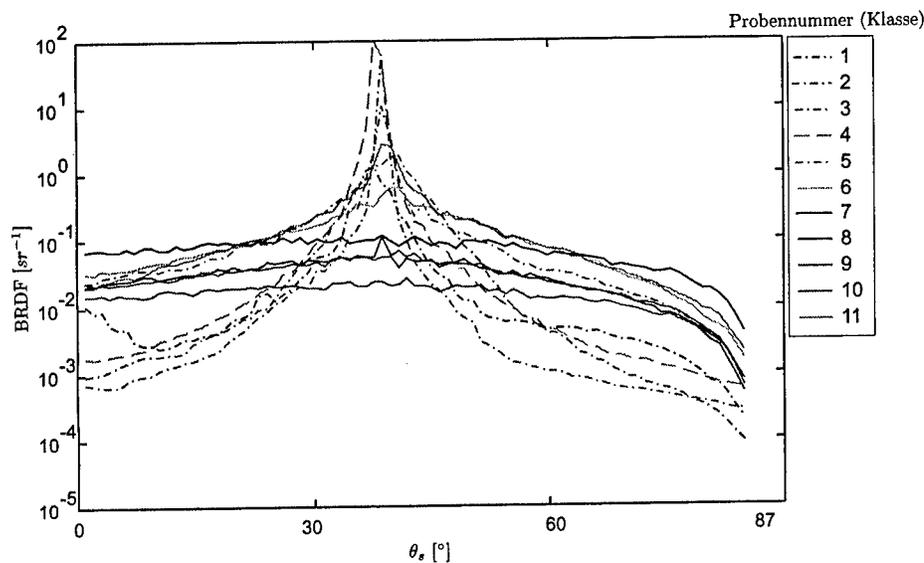


Abbildung 7.19: Gemittelte BRDF der 11 Probenoberflächen.

Proben zwei und vier am höchsten. Weiterhin ist festzustellen, daß sich die Kurven der Proben sieben und zehn nur geringfügig unterscheiden und somit deren Klassifikationsergebnisse besonders stark vom Trennvermögen der Merkmale abhängen. Für die eigentliche Klassifikation wird der gesamte Datensatz von 100 Messungen pro Probe in einen Anlern Datensatz und einen Testdatensatz mit jeweils 50 Messungen pro Probe unterteilt. Ziel ist es, unter Verwendung der vorgeschlagenen Merkmalsätze geeignete Klassifikatoren mit dem Anlern Datensatz zu trainieren und anschließend die Klassifikationsgüte mit dem Testdatensatz zu verifizieren.

Bevor auf die eigentliche Auswertung der Klassifikationsergebnisse eingegangen wird, sollen zunächst die einzelnen Merkmalskurven über den Anlern Datensatz betrachtet werden. Im Anhang C sind die Merkmalskurven über die Observationsnummer für die einzelnen Merkmalsätze dargestellt. Für alle Merkmalsätze läßt sich eine geringe Separierbarkeit der Merkmale der Klassen 8, 9 und 10 erkennen. Besonders bei den statistischen Momenten läßt sich das Verhältnis der geringen Merkmalswerte dieser Gruppen zu den hohen Werten und Schwankungen der anderen Gruppen durch eine Logarithmierung etwas kompensieren. Die Koeffizienten der Approximation des *Meister*-Modells weisen sprunghafte Merkmalsänderungen innerhalb der Klassen 4, 5 und 6 auf. Diese unerwünschten Sprünge in den Merkmalen sind auf nahezu gleiche Minima bei unterschiedlichen Parameterkonfigurationen in der nichtlinearen Optimierung zurückzuführen und verursachen eine Mehrdeutigkeit der Merkmale.

Geht man von einem globalen Extremwert und damit auch einer eindeutigen Merkmalskonfiguration aus, läßt sich für den Fall einer Funktionsapproximation die Güte der Merk-

male anhand ihres Approximationsfehlers beurteilen und entsprechend Gl. 4.40 mit Hilfe des χ^2 -Anpassungstests quantifizieren. In Abbildung 7.20 sind die Approximationsfehler der *Phong*-, *Meister*- und Splineapproximation als χ^2 -Werte über den Observationen der einzelnen Klassen aufgetragen. Die horizontalen Linien stellen die Quantile des χ^2 -Tests dar. Es

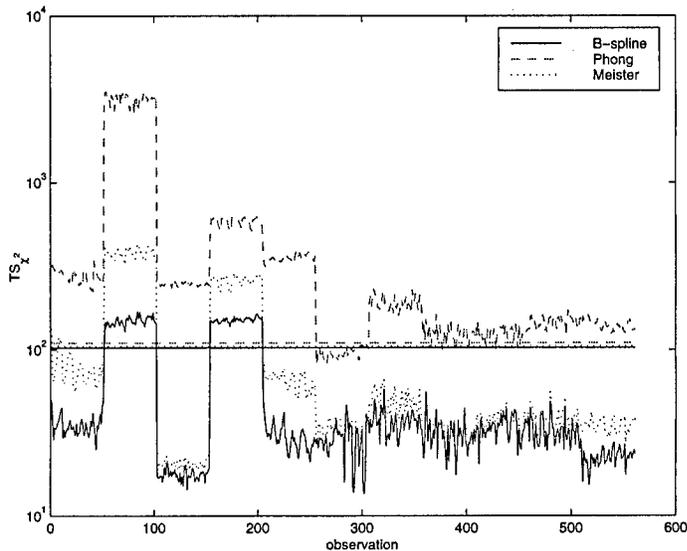


Abbildung 7.20: χ^2 -Werte des Approximationsfehlers der *Phong*-, *Meister*- und Splineapproximation vs. Observationsnummer bzw. Klasse.

ist festzustellen, daß die B-Splineapproximation die geringsten Approximationsfehler liefert und nur für die Klassen 2 und 4 oberhalb des Quantils liegt. Die *Meister*-Approximation zeigt deutlich größere Fehler in den Klassen 1,2,4 und 5, die Teststatistikwerte liegen aber ebenfalls nur für die Klassen 2 und 4 oberhalb des zugehörigen Quantils. Das schlechteste Approximationsergebnis liefert die *Phong*-Approximation, nur die Teststatistikwerte der Klasse 6 liegen unterhalb des Quantils. Dieses Ergebnis ist durch die in Abschnitt 4.5.3 diskutierten Grenzen des Modellansatzes der *Phong*-Approximation begründet und führt vor allem bei asymmetrischen Streuverteilungen mit einer spekularen Komponente zu höheren Approximationsfehlern.

Um eine quantitative Aussage zur Leistungsfähigkeit der Merkmale bezüglich ihrer Trennfähigkeit zwischen den einzelnen Klassen zu erhalten, werden die Datensätze mit Klassifikatoren klassifiziert und anschließend die Klassifikationsergebnisse verglichen. Es sollen die nachfolgend aufgeführten Klassifikatoren zur Anwendung kommen.

- **Neuronales Netz *Perceptron*** konfiguriert mit 11 Neuronen in der Ausgabeschicht.
- **Neuronales Netz *Feed-Forward*** konfiguriert als zweischichtiges Netzwerk, wobei die Anzahl der Eingangsneuronen der Anzahl der Merkmale entspricht. Die Ausgabe-

schicht ist ebenfalls mit einem Neuron pro Klasse ausgestattet. Das Klassifikationsergebnis ist durch das Ausgabeneuron mit der höchsten Aktivierung gegeben.

- **Neuronales Netz *Radial-Basis-Funktion*** entspricht in seiner Konfiguration der des *Feed-Forward*-Netzes.
- **Diskriminanzanalyse** s. Anlage A.

Für eine Beschreibung der verwendeten neuronalen Klassifikatoren sei auf die Literatur verwiesen [56,72]. Nach dem Anlernen der Klassifikatoren mit den Merkmalen des Anlernsatzes (11 Klassen mit je 50 Observationen) erfolgt zum einen eine Reklassifikation des Anlernsatzes und zum anderen eine Klassifikation der Merkmale des Testdatensatzes (ebenfalls mit 50 Observationen pro Klasse). Für beide Datensätze liegen die Klassenzugehörigkeiten der einzelnen Observationen als a-priori Information vor, so daß anschließend eine quantitative Aussage über die Anzahl der Fehlklassifikationen getroffen werden kann. In Tabelle 7.1 sind die Klassifikationsergebnisse in Abhängigkeit von Merkmalsatz und Klassifikator zu sehen. Vergleicht man die Klassifikationsergebnisse der Klassifikatoren unabhängig von den gewählten Merkmalen, zeigen die Diskriminanzanalyse und das *Feed-Forward*-Netzwerk die besten Klassifikationsergebnisse. Die Klassifikationsergebnisse des *Perceptron*-Netzwerks sind nur unzureichend und die Ergebnisse der Klassifikation des Testdatensatzes mit dem *Radial-Basis-Funktion*-Netzwerk weisen ebenfalls eine hohe Anzahl an Fehlklassifikationen auf. Das einerseits hervorragende Klassifikationsergebnis des Anlernsatzes und das andererseits schlechte Abschneiden bei der Klassifikation des Testdatensatzes lassen darauf schließen, daß die Anlernmuster auswendig gelernt wurden und diese Netztopologie ungeeignet für die Problemstellung ist. Durch Einfügen einer zusätzlichen Neuronenschicht zwischen Eingangs- und Ausgangsschicht könnte dieses Ergebnis verbessert werden. Betrachtet man die Merkmalsätze unabhängig vom Klassifikator, zeigen die B-Spline Approximation und die statistischen Momente die besten Ergebnisse. Das etwas schlechtere Abschneiden des *Meister*-Modells ist auf Fehlklassifikationen in den Klassen 4, 5 und 6 und damit auf die bereits beschriebene sprunghafte Änderung der Merkmalskonfiguration zurückzuführen. Das *Phong*-Modell liefert nur in Verbindung mit der Diskriminanzanalyse gute Klassifikationsergebnisse.

Die wesentliche Erkenntnis dieser Untersuchungen liegt darin, daß durch an die Streulichtverteilung angepaßte Merkmale und geeignete Wahl des Klassifikators auch kleinste Unterschiede (siehe Verlauf der Streulichtverteilungen von Klasse 7 und 10 in Abb. 7.19) in der Streulichtverteilung klassifiziert und damit automatisch erkannt werden können. Ein wesentlicher Vorteil der merkmalsbasierten Auswertung ist die signifikante Reduktion der Meßdaten auf wenige Größen. In Abbildung 7.21 ist ein abschließendes Beispiel für die Visualisierung von Oberflächeneigenschaften mit Hilfe von Merkmalskarten gegeben. Die Abbildung zeigt drei verschiedene Merkmalskarten, berechnet aus der Rastermessung einer rauhen Stahloberfläche, aufgenommen mit dem faseroptischen Streulichtsensor. Es ist deutlich das unterschiedliche Ansprechen der einzelnen Merkmale auf Änderungen in der Oberflächentopographie zu erkennen.

Merkmalsatz	statistische Momente	zirkulare Momente	Phong-Modell	Meister-Modell	B-Spline Approximation	alle Merkmale
Klassifikator						
<u>Perceptron</u>						
Klassifikation des Anlernsatzes	75.3%	30.0%	22.2%	52.2%	90.2%	80.4%
Testsatzes	73.3%	26.7%	22.5%	39.6%	82.9%	62.4%
<u>Feed-Forward</u>						
Klassifikation des Anlernsatzes	92.4%	82.9%	62.5%	78.9%	94.7%	93.3%
Testsatzes	95.0%	86.5%	73.8%	93.6%	98.6%	99.3%
<u>Radial-Basis-Funktion</u>						
Klassifikation des Anlernsatzes	100.0%	98.4%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
Testsatzes	82.2%	15.9%	51.5%	10.3%	44.4%	10.3%
<u>Diskriminanzanalyse</u>						
Klassifikation des Anlernsatzes	98.4%	86.6%	90.4%	81.8%	99.5%	99.8%
Testsatzes	99.1%	81.8%	88.4%	74.9%	97.7%	99.8%

Tabelle 7.1: Klassifikationsresultate für unterschiedliche Klassifikatoren und Merkmalsätze; die Zahlen stellen die prozentuale Anzahl richtiger Klassifikationen dar.

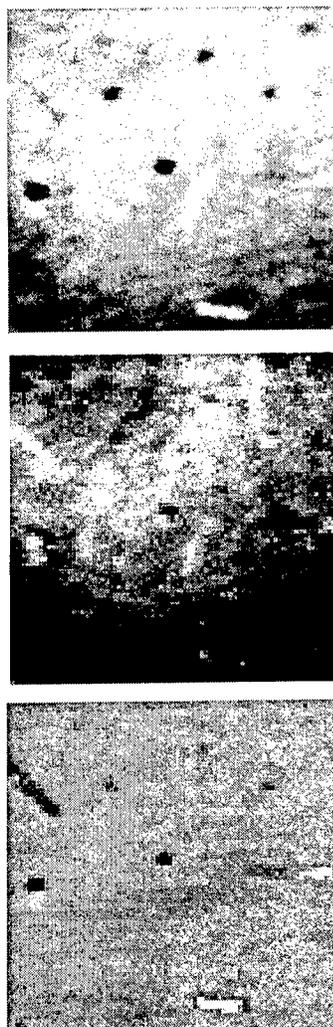


Abbildung 7.21: Merkmalskarten einer Rastermessung an einer rauhen Stahloberfläche mit dem faseroptischen Streulichtsensor, v.o.n.u: Mittelwert, Standardabweichung, Schiefe.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Streulichtbasierte Oberflächenprüfverfahren sind vor allem in der Fertigung von präzisionsoptischen Bauelementen und in der Halbleiterindustrie etabliert. Vorteile des Streulichtverfahrens für die Oberflächenprüfung sind zum einen eine hohe Empfindlichkeit gegenüber kleinsten Änderungen der Oberflächentopographie und zum anderen eine geringe Prüfzeit. Streulichtverfahren unterliegen nicht der Beugungsbegrenzung abbildender optischer Systeme und sind somit auch in der Lage, Strukturen kleiner als die Wellenlänge der Beleuchtung zu prüfen. Diese Eigenschaften zeichnen das Streulichtverfahren für eine on-line Prüfung technischer Präzisionsoberflächen aus.

In Auswertung des Standes der Technik aus Kapitel 2 zeigt sich jedoch, daß (ausgenommen die oben genannten Bereiche Präzisionsoptik und Halbleiterindustrie) derzeit einer weiten Verbreitung dieses Prüfverfahrens ein Mangel an universell einsetzbarer, on-line fähiger Sensorik und an entsprechenden Signalverarbeitungsalgorithmen entgegen stehen. Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist es daher, on-line fähige Streulichtsensoren zu entwickeln, deren Leistungsfähigkeit experimentell nachzuweisen, und Ansätze für geeignete Auswertverfahren zu untersuchen.

Zunächst werden im Kapitel 4 die im Rahmen der Arbeit verwendeten Oberflächenkenngrößen und radiometrischen Kenngrößen erörtert. Eine Einführung in die Problematik der Lösung des inversen Streuproblems an glatten Oberflächen, basierend auf der *Rayleigh-Rice*-Theorie in Abschnitt 4.3, gibt Einblick in die Einschränkungen existierender Streulichttheorien. Möglichkeiten zur Berechnung der Streuung an kugelförmigen Einzeldefekten werden in Abschnitt 4.6 anhand der *Rayleigh*- und *Mie*-Streuung aufgezeigt. Anschließend werden - als Basis für mustererkennungsbasierte Auswertungsverfahren - verschiedene Merkmale für Streulichtverteilungen definiert. Die vorgestellten Merkmalsgruppen umfassen zum einen statistische Merkmale und zum anderen Merkmale, die auf Funktionsapproximationen beruhen.

Aus der Zielsetzung der Arbeit in Kapitel 3 werden die Anforderungen an die zu realisierenden Streulichtsensoren in Kapitel 5 abgeleitet.

In Kapitel 5.3 wird der Aufbau eines faseroptischen Streulichtensors beschrieben, der basierend auf einem Patent von *Rothe* und *Riedel* [76] im Rahmen der Arbeit realisiert wurde. Der Streulichtsensor ermöglicht die parallele Aufnahme der Lichtstreuverteilung in bis zu sechs Azimutwinkeln. Mit Hilfe der in Abschnitt 5.3.3 vorgestellten Modellierung des radiometri-

schen Sensorverhaltens und der davon abgeleiteten Sensorkalibrierung ist eine radiometrische Anbindung des faseroptischen Streulichtsenors gegeben. In Abschnitt 5.3.5 sind die Ergebnisse der Kalibrierungs- und Verifikationsmessungen dargestellt. Die Streulichtmessungen an verschiedenen Oberflächen mit einer bekannten BRDF weisen einen Fehler von weniger als 15% vom Nominalwert der BRDF auf. Der stochastische Fehler des faseroptischen Streulichtsenors ist von der Signalamplitude abhängig und ergibt einen relativen Fehler von 3% auf *Lambertschen* Oberflächen und einen relativen Fehler von ca. 10% für stark reflektierende Oberflächen. Aufgrund des geringen Füllfaktors (Verhältnis der Aperturen der Fasereingänge zu deren Abständen) reagiert der Sensor sehr empfindlich auf Winkeländerungen im direkten Reflex, die sich in einer Erhöhung des Meßfehlers im direkten Reflex niederschlagen. Folglich ist zu bemerken, daß der faseroptische Streulichtsensor insbesondere für Messungen außerhalb des direkten Reflexes geeignet ist und zur Charakterisierung von diffus streuenden und rauen Oberflächen eingesetzt werden kann.

Als neuartig kann die Entwicklung eines hochauflösenden planaren Streulichtsenors im Rahmen der Arbeit bezeichnet werden. Der Sensor ist in Kapitel 5.4 beschrieben und zeichnet sich durch einen einfachen Aufbau, einen Dynamikbereich von mehr als sechs Dekaden und eine an die Prüfaufgabe adaptierbare Auflösung und Meßgeschwindigkeit aus. Im Gegensatz zu dem faseroptischen Sensor erlaubt der planare Streulichtsensor eine vollständige Erfassung der Streuverteilung in azimuthaler Richtung in einem eingeschränkten Streuwinkelbereich¹. Die in Kapitel 5.4 vorgestellte Modellierung des radiometrischen Detektorverhaltens und eine Modellierung der Winkelaufösung des Detektors stellen die Grundlage für eine radiometrische Kalibrierung des Sensors dar. Experimentelle Kennlinienuntersuchungen der Sensorpixel in Kapitel 7.2 haben gezeigt, daß eine pixelweise Kalibrierung zur Korrektur des signalabhängigen FPN der Pixel notwendig ist. In Auswertung der Kalibriermessungen konnte über einen Dynamikbereich von 10^{-4} W/m^2 bis 100 W/m^2 ein relativer stochastischer Fehler von weniger als 1% nachgewiesen werden. Ein Vergleich der Nominalwerte verschiedener BRDF-Standards mit deren Meßwerten ergab einen maximalen relativen Meßfehler von 6% außerhalb des direkten Reflexes². Die Meßzeit des Sensors ist derzeit durch die softwareseitige Kennlinienkorrektur begrenzt und beträgt ca. 500 ms. Für eine Steigerung der Meß- und Auswertungsgeschwindigkeit ist eine Erweiterung des planaren Streulichtsenors um einen Mikroprozessor zur Steuerung des Auslesens und zur on-line Korrektur der Meßdaten sinnvoll. Resultierend aus der Entlastung des Hauptrechners von der zeitaufwendigen Kennlinienkorrektur und der Ansteuerung des Sensors folgt eine wesentliche Steigerung der Meßgeschwindigkeit des Streulichtsenors. Somit könnte der Sensor an der Grenze seiner Auslesegeschwindigkeit von $2 \mu\text{s}/\text{Pixel}$ betrieben werden, woraus eine Meßzeit inklusive Meßwertkorrektur von weniger als 20ms bei Verwendung des gesamten Sensorarrays resultieren würde. Da die Meßzeit proportional zur Anzahl der verwendeten Pixel ist, ließe sich beispielsweise durch eine Beschränkung auf 800 Pixel eine Meßzeit von etwa 2ms erreichen. Einen weiteren Ansatz für eine applikationsabhängige Optimierung bietet das Vorschalten einer streuarmlen Vorsatzoptik (z.B. Spiegelanordnung nach [58]) zur Erhöhung der Apertur des Streulichtsenors.

Die experimentellen Untersuchungen der Eigenschaften der realisierten Streulichtsenoren in Bezug auf die Oberflächencharakterisierung stellen einen weiteren Schwerpunkt der Arbeit

¹Der Streuwinkelbereich und damit die Apertur des Sensors ist von der gewählten Meßanordnung abhängig; für die vorliegenden Messungen wurde eine Apertur von $\pm 12^\circ$ verwendet.

²Auf Grund von Speckles ist ein erhöhter stochastischer Fehler im direkten Reflex zu beobachten, s. Abb 7.9

dar. Beispielhaft für diese Problematik wurde ein Probensatz von fünfzehn polierten Stahloberflächen mit unterschiedlicher Rauheit (5nm-80nm) und Oberflächenstatistik, sowohl im Ortsraum mit einem AFM als auch spektral mit dem planaren Streulichtsensor vermessen. Basierend auf der *Rayleigh-Rice*-Theorie widmet sich Kapitel 7.3 dem Vergleich dieser Messungen anhand der spektralen Leistungsdichtefunktionen und der quadratischen Mittenrauheit R_q . Vor allem in Richtung der unteren Bandbegrenzung sind infolge unterschiedlicher Meßgerätebandbreiten und in Abhängigkeit vom verwendeten Detrendingverfahren starke Abweichungen in den spektralen Rauheitsanteilen von Streulicht und AFM zu beobachten. Dennoch ist im Ortsfrequenzbereich $0.04\mu m^{-1} - 0.34\mu m^{-1}$ eine gute Übereinstimmung der PSDs als auch der integralen Rauheiten von Streulichtmessung und AFM-Messung zu beobachten, s. Abb. 7.10 und 7.11. Ein Vergleich der bandbegrenzten quadratischen Mittenrauheiten liefert für eine Bandbegrenzung von $0.04\mu m^{-1} - 0.3\mu m^{-1}$ einen signifikanten linearen Zusammenhang zwischen AFM- R_q und Streulicht- R_q mit einem Standardfehler von 6nm. Bei Betrachtung der zweidimensionalen PSDs der Streulicht-Messungen und AFM-Messungen zeigt sich, daß die Streulichtmethode infolge ihrer direkten Messung der PSD ein deutlich besseres Auflösungsvermögen im betrachteten Ortsfrequenzbereich ermöglicht und somit beispielsweise anisotrope Oberflächenstrukturen wesentlich besser auflöst, s. Abb. 7.13. Schlußfolgernd kann vermerkt werden, daß unter der Voraussetzung der Gültigkeit der *Rayleigh-Rice*-Theorie mit dem planaren Streulichtsensor die Meßbarkeit der bandbegrenzten zweidimensionalen PSD und den davon abgeleiteten statistischen Oberflächenkenngrößen nachgewiesen wurde.

Die Detektion von Oberflächendefekten und Partikeln stellt ein weiteres klassisches Anwendungsgebiet der Streulichtsensorik dar und wird experimentell in Kapitel 7.4 untersucht. Anhand von Rasterscans über verschiedene Bereiche einer polierten Waferoberfläche mit Häufungen von PSL-Kugeln bekannter Durchmesser konnten Kugeln mit einem Durchmesser von 55nm nachgewiesen werden. Ein Vergleich der integral über den Detektor gemessenen Streuquerschnitte mit denen nach der *Mie*-Theorie berechneten Streuquerschnitten zeigt für Kugeldurchmesser unterhalb von 150nm starke Abweichungen, welche auf eine mangelnde Modellierung der Kugel-Oberflächeninterferenzen und auf das Erreichen der Detektionsgrenze des Sensors zurückzuführen sind. Die beispielhafte Gegenüberstellung eines simulierten Streuquerschnittes einer $9.8\mu m$ Kugel und der entsprechenden Streulichtmessung demonstriert die Möglichkeit der Unterscheidung von Partikeln und Oberflächendefekten anhand ihrer winkelaufgelösten Streuverteilung. Hervorzuheben bleibt, daß in den Untersuchungen ein Verhältnis von einfallender Bestrahlungstärke zu kleinstem Defektdetektionssignal von $1 : 10^{12}$ erreicht wurde. Ansatz für zukünftige Untersuchungen zur Defektdetektion kann eine zusätzliche Messung des Polarisationsverhaltens der Defektdreuung sein. Hierfür könnte der Detektor mit einem drehbaren Polarisationsfilter versehen werden, so daß für aufeinanderfolgende Messungen durch Drehung des Polarisationsfilters unterschiedliche Polarisationszustände analysiert werden können. Grundlage hierfür sollte eine Modellierung der Analysatorrichtung in Abhängigkeit von der Einzeldetektorposition und der Drehung des Polarisationsfilters sein.

Der letzte Abschnitt des Kapitels 7 widmet sich dem experimentellen Vergleich der in der Arbeit vorgestellten Streulichtmerkmale in Verbindung mit vier verschiedenen Klassifikatoren. Es konnte gezeigt werden, daß mit einer mustererkennungsbasierten Auswertung auch kleinste Unterschiede in der Ausprägung der Streulichtverteilung sicher klassifiziert werden können. Die besten Klassifikationsergebnisse wurden mit den Merkmalsgruppen statistische

Momente und B-Spline Approximation und in Verbindung mit den Klassifikatoren Diskriminanzanalyse und *Feed-Forward* Netzwerk erreicht. Ziel weiterer Untersuchungen könnte sein, Merkmale zu entwickeln, die durch einen Anlernprozeß gesteuert, eine Reduktion der Streulichtdaten auf wenige signifikante Merkmale ermöglichen und idealerweise auch einen Rückschluß auf signifikante Streuraumwinkel zulassen. Neben der damit verbundenen Datenreduktion hätte eine solche Vorgehensweise den Vorteil, daß mit Kenntnis der signifikanten Detektionsbereiche auch nur diese vom Sensor ausgelesen werden müßten und somit eine weitere Verringerung der Meßzeit erreicht werden würde. Resultierend erhält man ein Prüfsystem, dessen Optimum aus Prüfzeit (Klassifikationszeit und Meßzeit) und Klassifikationsgüte an die konkreten Erfordernisse einer Applikation adaptierbar ist.

Abschließend kann festgehalten werden, daß zwei zur Prüfung technischer Oberflächen geeignete Streulichtsensordaten realisiert wurden und deren Eignung zur Oberflächencharakterisierung nachgewiesen werden konnte. Potential für zukünftige Entwicklungen sieht der Autor zum einen in der anwendungsspezifischen Entwicklung von Streulichtanordnungen und zum anderen in der weiteren Entwicklung von - auf die Streulichtproblematik - zugeschnittenen Mustererkennungsverfahren.

Literaturverzeichnis

- [1] ASMAIL, C. C., C.L. CROMER, J.E. PROCTOR und J.J. HSIA: *Instrumentation at the National Institute of Standards and Technology for bidirectional reflectance distribution (BRDF) measurements*. In: *Stray Radiation in Optical Systems III*, Band 2260 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 52–61, 1994.
- [2] ASMAIL, CLARA, JACK FULLER und ROBERT PARKS: *Status of Bidirectional Reflectance Distribution Function (BRDF) Calibration Standards Development*. Band 1242-2 der Reihe *Proc. SPIE*, 1993.
- [3] ASTM: *ASTM F1048: Test Method for Measuring the Effective Surface Roughness of Optical Components by Total Integrated Scattering*.
- [4] ASTM SUBCOMMITTEE E12.09: *ASTM E1392: Standard Practice for Angle Resolved Optical Scatter Measurements on Specular or Diffuse Surfaces*, 1990.
- [5] ASTM SUBCOMMITTEE E12.09: *ASTM E12.09: Standard Practice for Characterizing Roughness of Optical Surfaces from Surface Profile Data*, 1993. draft TAL93051.
- [6] B46, ASME STANDARDS COMMITTEE: *ANSI/ASME B46.1-1985: Surface Texture (Surface Roughness, Waviness, and Lay)*. ANSI, ASME, 1985. Revision of ANSIB46.1-1978.
- [7] BARNETT, D.: *Matlab Mie Functions*, 1997.
- [8] BAUMGART, J. W. und H. TRUCKENBRODT: *Scatterometry of honed surfaces*. *Optical Engineering*, 37 No. 5:1435–1441, Mai 1998.
- [9] BECKMANN, P. und A. SPIZZICHINO: *The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surfaces*. Pergamon Press, New York, USA, 1963.
- [10] BENNETT, J. M. und L. MATTSSON: *Introduction to Surface Roughness and Scattering*. Optical Society of America, Washington DC, 1989.
- [11] BERGMANN, SCHAEFER: *Lehrbuch der Experimentalphysik Optik, Band 3*. de Gruyter, Berlin/New York, 9. Auflage, 1993.
- [12] BISCHOFF, J., J. W. BAUMGART, H. TRUCKENBRODT und J. J. BAUER: *Photoresist metrology based on light scattering*. Nummer 2101-4 in *Proc. SPIE*, 1996.

- [13] BISCHOFF, J. B., L. H. HUTSCHENREUTHER und H. TRUCKENBRODT: *New aspects of optical scatterometry applied to microtechnology*. In: *Symposium and Education Program on Microelectronic-Manufacturing, Austin TX, USA*, Band 3050-50 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 606-619, October 1997.
- [14] BLUDAU, W.: *Halbleiter-Optoelektronik*. Carl-Hanser Verlag, München/Wien, 1995.
- [15] BOHREN, CRAIG F. und DONALD R. HUFFMAN: *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Jon Wiley & Sons, Inc., New York, USA, 1998.
- [16] BUDE, W.: *Physical Detectors of Optical Radiation*, Band 4 der Reihe *Optical Radiation Measurements*. Academic Press, Inc., Orlando, Florida, 1983.
- [17] CASTONGUAY, RAYMOND J.: *Accuracy and Repeatability Results of OMNISCATRTM, a High Speed, High Resolution, Three Dimensional Scatterometer*. In: *Stray Radiation in Optical Systems III*, Band 2260 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 74-82, 1994.
- [18] CHATEAU, N. und J. P. HUGONIM: *Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction*. *J. Opt. Soc. Am.*, 11:1321-1331, 1994.
- [19] CHURCH, E. L., H. A. JENKINSON und J. M. ZAVADA: *Measurement of the finish of diamond-turned metal surfaces by differential light scattering*. *Opt. Eng.*, 16 No. 4:360-374, 1977.
- [20] CHURCH, E. L., H. A. JENKINSON und J. M. ZAVADA: *Relationship between surface scattering and microtopographic features*. *Opt. Eng.*, 18 No. 2:125-136, 1979.
- [21] CHURCH, E. L. und J. M. ZAVADA: *Residual surface roughness of diamond-turned optics*. *Appl. Optics*, 14:1788, 1975.
- [22] COLTON, RICHARD J. und OTHERS: *Procedures in Scanning Probe Microscopies*. John Wiley & Sons Ltd, West Sussex, England, 1998.
- [23] DAVIES, H.: *The reflection of electromagnetic waves from a rough surface*. Band 101 der Reihe *Proc. Inst. Elec. Engrs.*, Seite 209, 1954.
- [24] DEBOOR: *A Practical Guide to Splines*. Carl Springer, 1978.
- [25] DILLON, W. R. und M. GOLDSTEIN: *Multivariate Analysis*. Wiley, 1984.
- [26] DIN E.V., Beuth Verlag GmbH, Berlin/Köln: *DIN 5031*.
- [27] DIN E.V., Beuth Verlag GmbH, Berlin/Köln: *DIN 4761: Oberflächencharakter, Geometrische Oberflächentextur-Merkmale, Begriffe, Kurzzeichen*, 1978.
- [28] DIN E.V., Beuth Verlag GmbH, Berlin/Köln: *DIN 4762: Oberflächenrauheit, Begriffe, Oberflächen und ihre Kenngrößen, Identisch mit ISO 4287/1 :1984*, 1989.
- [29] DRAINE, B. T. und P. J. FLATAU: *Discrete-dipole approximation for scattering calculations*. Band 11 der Reihe *OSA*, Seiten 1491-1499, 1994.
- [30] E. HERING, K. BRESSLER, J. GUTEKUNST: *Elektronik für Ingenieure*. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1992.

- [31] ELSON, J. M. und J. M. BENNETT: *Vector Scattering Theory*. Optical Engineering, 18 - 2:116-124, 1979.
- [32] ENGELN-MÜLLGES, G. und F. REUTTER: *Numerische Mathematik für Ingenieure*. Bibliographisches Institut, 5. Auflage, 1987.
- [33] F. GRUM, R. J. BECHERER: *Radiometry*, Band 1 der Reihe *Optical Radiation Measurements*. Academic Press, Inc., New York, 1979.
- [34] FISHER, N. I.: *Statistical Analysis of Spherical Data*. University Press, Cambridge, UK, 1993.
- [35] FISHER, N. I.: *Statistical Analysis of Circular Data*. University Press, Cambridge, UK, 1995.
- [36] GERMER, T. A. und C. C. ASMAIL: *A goniometrical optical scatter instrument for bidirectional reflectance distribution function measurements with out-of-plane and polarimetry capabilities*. In: *Scattering and Surface Roughness*, Band 3141-22 der Reihe *Proc. SPIE*, 1997.
- [37] GERMER, THOMAS A. und CLARA C. ASMAIL: *Proposed Methodology for Characterization of Microroughness-Induced Optical Scatter Instrumentation*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862-12 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 12-17, 1996.
- [38] GMBH, LPKF: *Handbuch LPKF HS*, 1996.
- [39] HARVEY, J. H. und C. L. VERNOLD: *Transfer function characterization of scattering surfaces: Revisited*. Nummer 3141-13 in *Proc. SPIE*, 1997.
- [40] HIRLEMAN, E. DAN und B. Y. H. LIU: *Consortium for Metrology of Semiconductor Nanodefects*, 1995.
- [41] HOLST, G. C.: *CCD arrays, cameras, and displays*. SPIE Optical Engineering Press, Bellingham, Washington, USA, 1996.
- [42] HOSCHEK, JOSEF: *Grundlagen der geometrischen Datenverarbeitung*. Teubner Verlag Stuttgart, 2. Auflage, 1992.
- [43] HÜSER, D. und H. ROTHE: *Intelligent Triangulation Sensors – Independent of Measuring Objects's Properties*. In: AL., H. KUNZMANN ET (Herausgeber): *Progress in Precision Engineering and Nanotechnology*, Nummer ISBN 3-9801433-9-2 in *Proc. of the 4th Int. Conf. UME*, 1997.
- [44] JAHN, R., H. TRUCKENBRODT, T. MEINECKE und H. WÜRTENBERGER: *Defekte auf polierten Flächen schnell erkennen*. F&M, 106 Heft 5:314-318, 1998.
- [45] JAKOBS, S., A. DUPARR und H. TRUCKENBRODT: *Interfacial roughness and related scatter in UV-optical coatings: a systematic experimental approach*. Band 37, No. 7, Seiten 1180-1193, 1998.
- [46] J HNE, BERND: *Digitale Bildverarbeitung*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 4. Auflage, 1997.

- [47] KLEEMANN, B. H., J. BISCHHOFF und A. K. WONG: *Alternate rigorous method for photolithographic simulation based on profile sampling*. Nummer 2102-2 in *Proc. SPIE*, 1996.
- [48] KLEI, E. B., N. SCHUSTER und H. TRUCKENBRODT. Patentschrift P4423802.9.
- [49] KUMPE, R.: *Streulicht- und Rastertunnelmikroskop-Untersuchungen an optischen Siliciumoberflächen*. Doktorarbeit, Düsseldorf, 1997.
- [50] LABSPHERE: *Diffuse Reflectance Coatings and Materials*, 1996.
- [51] LAFORTUNE, E. P. und Y. D. WILLEMS: *Using the Modified Phong Reflectance Model for Physically Based Rendering*. Technischer Bericht Department of Computing Science, K. U. Leuven, November 1994.
- [52] LANCASTER, P. und K. SALKAUSKAS: *Curve and Surface Fitting*. Academic Press, 1986.
- [53] LIM, JAE S.: *Two-dimensional Signal and Image Processing*. Prentice Hall, 1989.
- [54] MARX, EGON und T. V. VORBURGER: *Light scattered by random rough surfaces and roughness determination*. In: *Scatter from Optical Components*, Nummer 1165 in *Proc. SPIE*, Seiten 72-86, 1989.
- [55] MATHWORKS: *Optimization Toolbox User's Guide*. MathWorks, Inc., 1996.
- [56] MATHWORKS: *Neuronal Toolbox User's Guide*. MathWorks, Inc., 1997.
- [57] MATHWORKS: *Spline Toolbox*. MathWorks, Inc., 1997.
- [58] MATTISON, P. R., M. S. DOMBROWSKI, J. M. LORENZ, K. J. DAVIES, H. C. MANN und P. JOHNSON: *Hand-held directional reflectometer: an angular imaging device to measure BRDF and HDR in real time*. In: *Scattering and Surface Roughness II*, Band 3426-31 der Reihe *Proc. SPIE*, 1998.
- [59] MEISTER, G., R. WIEMKER, J. BIENLEIN und H. SPITZER: *In Situ Measurements of Selected Surface Materials to Improve Analysis of Remotely Sensed Multispectral Imagery*. Proceedings of the XVIII. Congress of the International Society for Photogrammetry and Remote Sensing ISPRS, XXXI (B7):493-498, 1996.
- [60] MUDRA, R., M. THALER und G. TRISTER: *Smart Camera System*. In: *Advanced Focal Plane Arrays and Electronic Cameras*, Band 2950 der Reihe *SPIE, Proc. Europto Series*, Seiten 185-195, 1996.
- [61] MULHOLLAND, GEORGE W., NELSON BRYNER, WALTER LIGGET, BRADLEY W. SCHEER und RANDAL K. GOODALL: *Selection of calibration particles for scanning surface inspection systems*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862-12 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 104-118, 1996.
- [62] NEUBERT, JAKOB und THOMAS SEIFERT: *Fully automated angle resolved scatterometer*. Band 2209 der Reihe *Proc. SPIE*, 1994.

- [63] NICODEMUS, F. E., J. C. RICHMOND, J. J. HSIA, I. GINGSBERG und T. LIMBERIS: *Geometric Considerations and Nomenclature for Reflectance*. In: *NBS Monograph 160*. U.S. Dept. of Commerce, 1977.
- [64] PARDO, F., J. A. BOLUDA, J. J. P. REZ, B. DIERICKX und D. SCHEFFER: *Design issues on CMOS space-variant image sensors*. In: *Advanced Focal Plane Arrays and Electronic Cameras*, Band 2950 der Reihe *SPIE, Proc. Europto Series*, Seiten 98–107, 1996.
- [65] PARDO, F., J. A. BOLUDA, J. J. P. REZ, S. FELICI, B. DIERICKX und D. SCHEFFER: *Response properties of a foveated space-variant CMOS image sensor*. IEEE, International Symposium on Circuits And Systems, ISCAS'96, Seiten 373–376, 1996.
- [66] PHONG, B. T.: *Illumination for Computer Generated Pictures*. Communications of the ACM, 18(6):311–317, 1975.
- [67] RAUBER, THOMAS: *Algorithmen in der Computergraphik*. Teubner Verlag Stuttgart, 1993.
- [68] RICQUIER, N. und B. DIERICKX: *Pixel structure with logarithmic response for intelligent and flexible imager architectures*. Microelectronic Engineering, 19:631–634, 1992.
- [69] RINDER, T. und H. ROTHE: *Characterization of surfaces using neural pattern recognition methods based on BRDF and AFM measurements*. In: GU, Z.-H. und A. MARADUDIN (Herausgeber): *Scattering and Surface Roughness III*, Nummer 3784B-15 in *Proc. SPIE*, 1999.
- [70] ROTHE, H.: *Multivariate Estimation of the Systematic Error of Scanning Probe Microscopes*. Thin Solid Films, 264:282–290, 1995.
- [71] ROTHE, H., A. D. DUPARRÉ und S. JAKOBS: *Generic Detrending of Surface Profiles*. Optical Engineering, 33(9):3023–3030, 1994.
- [72] ROTHE, H., A. V. D. FECHT, A. KASPER und T. RINDER: *Practical Application of Pattern Recognition Techniques*. In: *NATO lecture series 214*, 1998.
- [73] ROTHE, H. und D. H. SER: *Manuskript zur Vorlesung Me technik*. Universität der Bundeswehr Hamburg, FB MB, Me - und Informationstechnik, 1998.
- [74] ROTHE, H. und D. HÜSER: *Application of circular and spherical statistics for the interpretation of BRDF-measurements*. In: *Scattering and Surface Roughness*, Nummer 3141-02 in *Proc. SPIE*, 1997.
- [75] ROTHE, H., D. HÜSER, A. KASPER und T. RINDER: *Derivation of BRDF from smooth surface topography of large AFM scans – investigation of the influences of surface figures and AFM artefacts*. In: GU, Z.-H. und A. MARADUDIN (Herausgeber): *Scattering and Surface Roughness III*, Nummer 3784B-21 in *Proc. SPIE*, 1999.
- [76] ROTHE, H. und P. RIEDEL: *Defekt-Klassifizierungs-Gerät*. Patentschrift P4321042.2-09, Veröffentlichung: 06.06.1993.
- [77] ROTHE, H. und H. TRUCKENBRODT: *Discrimination of Surface Properties Using BRDF-Variance Estimators as Feature Variables*. Nummer 1781 in *Proc. SPIE*, 1992.

- [78] ROTHE, H., H. TRUCKENBRODT und A. HERTZSCH: *Separation of Roughness from Defects on Smooth Metal and Glass Surfaces*. In: WECK, M. und H. KUNZMANN (Herausgeber): *Ultraprecision in Manufacturing Engineering*, Proc. of the 3rd Int. Conf. UME, 1994.
- [79] SCHAEEL, U.: *Bestimmung der Eigenschaften eines neuartigen Streulichtensors*. Diplomarbeit, Universität der Bundeswehr Hamburg, FB MB, 1998.
- [80] SCHEER, BRADLEY W.: *Development of a physical haze and microroughness standard*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862-12 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 78-95, 1996.
- [81] SCHROETER, T., T. POSSNER, T. WEIGEL und N. CZARNETZKI: *Lichtmeßanordnung zur Messung der winkelabhängigen Lichtverteilung im Raum*. Patentschrift DE 4139641C2, Anmeldung: 02.12.91, Offenlegung: 03.06.93, Veröffentlichung: 06.07.95.
- [82] SEMLEIT, D.: *Konzeption und Realisierung eines in-situ- und on-line-Meßverfahrens zur Partikeldetektion auf transparenten Oberflächen*. Doktorarbeit, Gerhard-Mercator-Universität-Gesamthochschule Duisburg, FB Elektrotechnik, Duisburg, 1997.
- [83] STARR, G. W. und E. D. HIRLEMAN: *Comparison of Experimentally Measured Differential Scattering Cross Section of PSL Spheres on Flat Surfaces and Patterned Surfaces*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 130-138, 1996.
- [84] STOER, JOSEF: *Numerische Mathematik*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 19. Auflage, 1979.
- [85] STOVER, J. C.: *Optical Scattering: Measurement and Analysis*. SPIE, PO Box 10, Bellingham, Washington, USA, 2nd Auflage, 1995.
- [86] THOMANN, J., G. KASCH, J. FOTTNER und D. STIEF: *Handbuch der Datenwandlung*. Datel GmbH, München, 1990.
- [87] TOPOMETRIX: *User's Manual, Ver. 3.05*, 1996.
- [88] WAGNER, P., H. A. GERBER, R. SCHMOLKE und R. VELTEN: *Requirements of future measurement equipment for silicon wafers*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862-20 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 152-162, 1996.
- [89] WEEKS, ARTHUR R.: *Fundamentals of Electronic Image Processing*. SPIE Optical Engineering Press, 1996.
- [90] WEIGEL, T.: *Konzeption, Aufbau und Steuerung eines zweidimensionalen Scatterometers*. Doktorarbeit, 1992.
- [91] WEINGRABER, H. V. und M. ABOU-ALI: *Handbuch Technische Oberflächen*. Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1989.

-
- [92] WELCH, K.: *Utilization of near specular energy in the detection of surface defects*. In: *Flatness, Roughness, and Discrete Defect Characterization for Computer Disks, Wafers, and Flat Panel Displays*, Band 2862 der Reihe *Proc. SPIE*, Seiten 119–128, 1996.
- [93] WERNSTEDT, J.: *Experimentelle Proze analyse*. R. Oldenburg Verlag München Wien, 1989.
- [94] WHITEHOUSE, D. J.: *Handbook of Surface Metrology*. Institute of Physics Publishing, Bookcraft Ltd., Bath (GB), 1994.
- [95] WONG, A., R. GUERRIERI und A. NEUREUTHER: *Massively parallel electromagnetic simulation for photolithographic applications*. *IEEE-CAD*, 14 No. 10:1231–1240, October 1995.
- [96] ZAIDI, S., S. L. MCNEIL und S. S. H. NAQVI: *Metrology sensors for advanced resists*. Band 2196-52 der Reihe *Proc. SPIE*, 1994.

Symbolverzeichnis

Variablen

α_G, E_G	Detektorkonstanten
α_i	Polarwinkel von \vec{d}_i
β'	Abbildungsmaßstab
Δ_L	diskreter Laplaceoperator
Δ_t	Integrationszeit des Detektors
ϵ	Dielektrizitätskonstante
η	Quantenwirkungsgrad des Detektors
$\frac{dC_s}{d\Omega}$	differentieller Streuquerschnitt eines Partikels
λ	Lichtwellenlänge
\vec{d}_i	Position eines Einzeldetektors im Detektorkoordinatensystem
\vec{e}_x, \vec{e}_y	transformierte Einheitsvektoren
\vec{e}_x, \vec{e}_y	Einheitsvektoren
\vec{o}	Vektor zum Detektorursprung
\vec{s}	Position eines Einzeldetektors im BRDF Koordinatensystem
$\bar{\theta}$	mittlere Richtung in der zirk. Statistik
\bar{d}	mittlere Absolutabweichung
\bar{R}	mittlere Länge in der zirk. Statistik
\bar{x}	arithmetischer Mittelwert
\hat{U}_q	Quantisierungsfehler
Ω_s	Raumwinkelbereich des Streustrahlungsdetektors
ϕ_0	Winkel zwischen Einfallsebene und Detektornormale
ϕ_s	Azimutwinkel des Detektors bezogen auf die Einfallsebene
Φ_i	einfallende Strahlungsleistung
Φ_r	reflektierte Strahlungsleistung
Φ_s	gestreute Strahlungsleistung
π_n, τ_n	Kugelfunktionen der <i>Mie</i> -Theorie
σ	Standardabweichung
σ_i^2	Varianz des i-ten Meßpunktes
σ_z	zirkulare Standardabweichung
σU_{pd}	Photodiodenrauschen
τ_c	Korrelationslänge
τ_s, τ_o, τ_f	Verschiebungswerte der Autokorrelationsfunktion
θ_0	Winkel zwischen Oberflächennormale und Detektornormale
θ_i	Winkel zwischen einfallender Beleuchtung und der Oberflächennormale
θ_s	Streuwinkel (Höhenwinkel) bezogen auf die Oberflächennormale
A	Fläche des Meßbereichs (Fläche des Beleuchtungsflecks)
a_i	Parameter der Approximationsfunktionen (de Boor Punkte in Verbindung mit B-Splines)
a_n, b_n	Streukoeffizienten der <i>Mie</i> -Theorie
A_s	Flächeninhalt eines Einzeldetektors
B	Kamerabild
$B_{i,k}(t)$	i -te B-Spline Funktion der Ordnung k
$BRDF(\theta_i, \theta_s, \phi_s)$	Streulichtverteilungsfunktion s.a. Abkz. BRDF
c	Lichtgeschwindigkeit, c_0 (c in Vakuum) $3 \cdot 10^8 [\frac{m}{s}]$

D^2	Approximationsfehler der B-Spline Approximation
D_x, D_y	Abtastlänge zwischen zwei Höhenwerten in x bzw. y Richtung
d_z	zirkulare dispersion
$dsnu_i$	Dark Signal Non Uniformity des i-ten Pixels
$dsnu_s$	Dark Signal Non Uniformity des Streuwinkels s
E_i	einfallende Bestrahlungsstärke
E_p	Photonenenergie
f'	Brennweite
$f(t_i)$	Approximationsfunktion an der i-ten Stelle
f_x, f_y, f_r	Ortsfrequenzwert in x, y, bzw. radialer Richtung
$f_{meister}$	Approximationsfunktion der BRDF nach <i>Meister</i>
f_{phong}	Approximationsfunktion der BRDF nach <i>Phong</i>
g, g_i, g_s	Grauwert
h	Plancksches Wirkungsquantum, $6.63 \cdot 10^{-34}[Js]$
I_d	Dunkelstrom
I_{pd}	Photodiodenstrom
I_p	Photostrom
J_d	Dunkelstromdichte
k	Ekzeß, Kurtosis
k	Wellenzahl
K	Korrelationsbild
k_B	Boltzmann Konstante, $1.38 \cdot 10^{-23}[J/K]$
k_s	Detektor-Korrekturfaktoren
k_z	zirkulare Kurtosis
k_{adc}	Umwandlungsfaktor des Analog-Digital-Wandlers
k_d	Detektorkonstante
$K_q, K_{qz}, K_{qy}, K_{q2}$	quadratische mittlere Profilneigung
L_s	gestreute Strahldichte
m	relativer Brechungsindex
m_p	zentrierte zirkulare Momente
m_i	spektrale Momente (Momente der PSD) i-ter Ordnung
N, M	Anzahl der Höhenmefwerte in x bzw. y Richtung
n_j	Winkelwiederholungswert
N_ϕ	Anzahl der Unterintervalle des BRDF-Wertebereichs
N_{adc}	Anzahl Digitalisierungsstufen
n_a	Detektor-Ausleserausachen in Elektronen
n_e	Anzahl Photoelektronen pro Zeit
n_p	Anzahl Photonen pro Zeit
NA	numerische Apertur
NEI_d	Detektorrauschen als rauschäquivalente Bestrahlungsstärke
NEI_q	Quantenrauschen als rauschäquivalente Bestrahlungsstärke
P	Reflektivität
P_i	i-ter Approximationspunkt
P_q, P_{q2}	quadratische mittlere Profilkrümmung
$prnu_i$	Photo Response Non Uniformity des i-ten Pixels
$prnu_s$	Photo Response Non Uniformity des Streuwinkels s
q	Elementarladung, $1.6021773 \cdot 10^{-19}[As]$
$Q, Q_{ss}, Q_{sp}, Q_{ps}, Q_{pp}$	polarisationsabhängiger optischer Faktor

Q_{max}	Sättigungsladung des Detektors
$R(\vec{e}_x, \phi_0), R(\vec{e}_y, \theta_0), R_g$	Rotationsmatrizen
R_0	Abstand Detektormittelpunkt zu Mittelpunkt des Beleuchtungsflecks auf der Oberfläche
$R_1(\tau_x), R_2(\tau_x, \tau_y)$	Autokorrelationsfunktion
R_i	Abstand Einzeldetektor zu Detektormittelpunkt
r_p	Partikelradius
R_s	Abstand Einzeldetektor zu Beleuchtungsmittelpunkt
R_q, R_{q_2}, rms	quadratischer Mittenrauheitswert (im Eng. rms)
s	Schiefe
S	Strukturelement
S	allg. spektrale Leistungsdichtefunktion (PSD)
$S_1(f_x)$	eindimensionale spektrale Leistungsdichtefunktion
$S_2(f_x, f_y)$	zweidimensionale spektrale Leistungsdichtefunktion
S_{\perp}, S_{\parallel}	Poyntingvektoren für s- und p-polarisierten Anteil
S_B	binäres Strukturelement
$S_k(t)$	B-Spline Kurve der Ordnung k
s_z	zirkulare Schiefe
T	Knotenvektor einer B-Spline Funktion
t_i	Knotenpunkte einer B-Spline Funktion
TS_{χ^2}	Wert der Teststatistik des χ^2 Tests
U_q	Effektivwert des Quantisierungsfehlers
U_{pd}	Photodiodenspannung
v	Varianz
v_z	zirkulare Varianz
x_p	relativer Partikelradius
$z'_{n,m}$	detrendetes Höhenprofil
z'_n	detrenderter Profilhöhenschnitt
$z_{n,m}$	Höhenwert an der Stelle (x_n, y_m)
z_n	Höhenwert eines Profilschnittes an der Stelle x_n

Abkürzungen

ADC	Analog to Digital Converter
AFM	Atomic Force Microscopy
AKF	Autokorrelationsfunktion
ARS	Angle Resolved Scattering
BRDF	Bidirectional Reflectance Distribution Function
BSDF	Bidirectional Scatter Distribution Function
CCD	Total Charge Coupled Device
CID	Charge Injected Device
DDA	Discrete Dipole Approximation
FPA	Focal Plane Array
FPN	Fixed Pattern Noise
GOSI	Goniometric Optical Scatter Instrument
HDR	Hemispherical Directional Reflectance
ISEMP	Integral Equation System Method
LPD	Light Point Defect
LS	Least Square

LSB	Least Significant Bit
MTF	Modulation Transfer Function
NEI	Noise Equivalent Irradiance
NEP	Noise Equivalent Power
p-Polarisation	lineare Polarisation, bei der die Schwingungsrichtung des E-Feldes parallel zur Einfall- bzw. Detektionsebene liegt
PSD	Power Spectrum Density
RCWT	Rigorous Coupled Wave Theory
rms	root mean square
RR	<i>Rayleigh-Rice</i> vector perturbation theory
s-Polarisation	lineare Polarisation, bei der die Schwingungsrichtung des E-Feldes senkrecht zur Einfall- bzw. Detektionsebene steht
SNR	Signal to Noise Ratio
TDFD	Time-Domain Finite-Difference
TIS	Total Integrated Scattering

Anhang A

Klassifikationsverfahren: Diskriminanzanalyse

Grundidee der strukturprüfenden Diskriminanzanalyse ist die Suche nach einer unkorrelierten Kombination von linearen Trennfunktionen, so daß eine maximale mittlere Separation zwischen den einzelnen Gruppen erreicht wird. Eine maximale Separation im Sinne der Diskriminanzanalyse ist gegeben, wenn die Streuung innerhalb der Gruppen minimal und die Streuung zwischen den Gruppen maximal ist. Abbildung A.1 veranschaulicht den Grundgedanken der Diskriminanzanalyse am Zweigruppenfall.

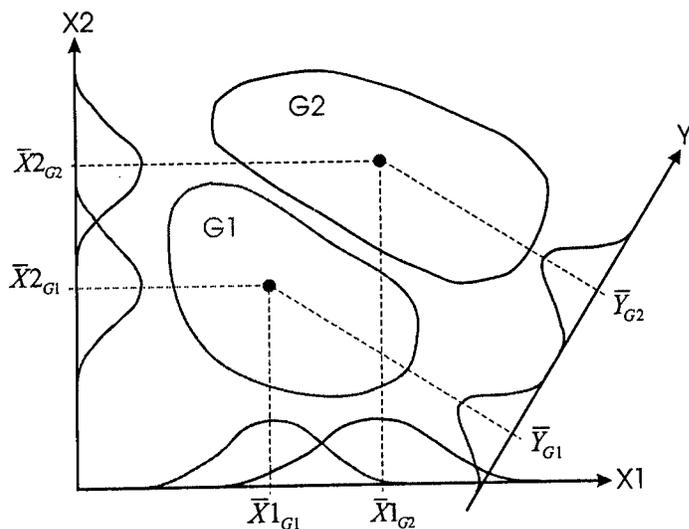


Abbildung A.1: Veranschaulichung der Diskriminanzanalyse anhand des Zweigruppenfalls, X_1 und X_2 stellen die Merkmalsachsen und Y die Diskriminanzachse dar.

Der zugrundeliegende Formalismus ist nachfolgend beschrieben, s.a. [25]. Ausgangspunkt sind k -Gruppen mit n_i Observationen in der i -ten Gruppe ($i = 1, 2, \dots, k$). Jede Observation besteht aus einem Merkmalsvektor $X' = (X_1, X_2, \dots, X_p)$ mit p -Merkmalen. Die Elemente X_{ij} der Observationsmatrix X stellen die j -ten Observationen der i -ten Gruppe dar. Weiterhin sei $\bar{x}' = \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_p$ definiert als der Mittelwertvektor aller Observationen und analog sei mit \bar{x}_i der Mittelwertvektor der i -ten Gruppe gegeben. Die Matrix T der mittelwertkorrigierten Quadratsummen der Kreuzprodukte aller Observationen ist gegeben durch

$$T = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{x})(X_{ij} - \bar{x})'. \quad (\text{A.1})$$

Entsprechend ist die Matrix W_i der mittelwertkorrigierten Quadratsummen der Kreuzprodukte der i -ten Gruppe definiert mit

$$W_i = \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{x}_i)(X_{ij} - \bar{x}_i)'. \quad (\text{A.2})$$

Die sog. Innergruppenmatrix W ergibt sich aus der Summe der W_i aller Gruppen $W = W_1 + W_2 + \dots + W_k$ und die sog. Zwischengruppenmatrix B resultiert dann aus $B = T - W$.

Entsprechend der eingangs erläuterten Grundidee soll das Verhältnis $\hat{\lambda}$ von Zwischengruppenstreuung zu Innergruppenstreuung bezogen auf die Diskriminanzfunktion $Y = \hat{b}'X$

$$\hat{\lambda} = \frac{\hat{b}'B\hat{b}}{\hat{b}'W\hat{b}} \quad (\text{A.3})$$

maximal werden. Die Maximalbedingung erhält man durch partielles Ableiten und Null setzen mit

$$(W^{-1}B - \hat{\lambda}I)\hat{b} = 0, \quad (\text{A.4})$$

wobei $\hat{\lambda}$ den Eigenwert und \hat{b} den zugehörigen Eigenvektor symbolisieren. Der prozentuale l -te Eigenwert von $W^{-1}B$ ergibt sich zu

$$\frac{\hat{\lambda}_l}{\sum \hat{\lambda}}, \quad (\text{A.5})$$

und gibt Aufschluß über die Trennkraft der zugehörigen Diskriminanzfunktion. Eine automatische Bestimmung der Anzahl von signifikanten Diskriminanzfunktionen ist mit Hilfe des statistischen *Bartlett*-Tests möglich. Für eine umfassende Darstellung der Diskriminanzanalyse und der in diesem Zusammenhang verwendeten statistischen Tests sei auf die Literatur verwiesen [25, 43, 78].

Basierend auf dem vorgestellten Verfahren wurde eine Klassifikationssoftware entwickelt, die eine echtzeitfähige Klassifikation von Streulichtdaten ermöglicht. In Abbildung A.2 ist das Funktionsmodell des Anlern- und Klassifikationsprozesses dargestellt. Der obere Teil der Graphik symbolisiert den Anlernprozeß, welcher als standalone-Programm mit grafischer Benutzeroberfläche umgesetzt wurde. Der untere Teil, die eigentliche Echtzeitklassifikation, wird durch eine Funktionsbibliothek realisiert, welche an die jeweilige Gerätesoftware gebunden ist. Die Kommunikation zwischen Anlernprozeß und Echtzeitklassifizierung erfolgt über einen Parameterfile, welcher alle für die Klassifikation notwendigen Daten enthält. Die wichtigsten Schritte beim Anlernen sind:

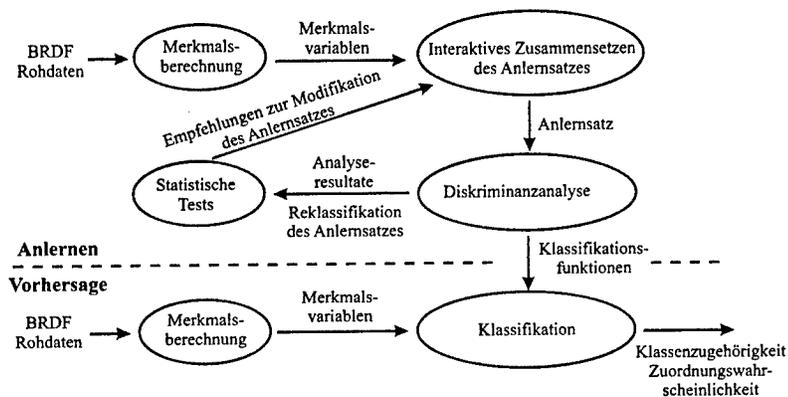


Abbildung A.2: Das Funktionsmodell zum Anlernen und Klassifizieren

1. Aufstellen einer Gruppenstruktur und Spezifikation der einzelnen Gruppen.
2. Auswahl geeigneter Merkmale.
3. Importieren von repräsentativen Beobachtungen.
4. Einordnen der Beobachtungen in den Trainingsdatensatz.
5. Diskriminanzanalyse durchführen.
6. Statistische Tests durchführen.
7. Wenn nötig modifizieren der Trainingsdaten und weiter bei 5.
8. Test der gefundenen Diskriminanzfunktionen mit neuen Datensätzen.

Das Anlernprogramm besitzt eine fileorientierte Datenschnittstelle, welche einen einfachen Datenaustausch mit einer Gerätesoftware oder anderen Standardprogrammen wie z.B. *Statistica* oder *Excel* ermöglicht. Damit ist es möglich, einen Anlernsatz in einem Tabellenkalkulationsprogramm zu erstellen und im Anlernprogramm weiter zu bearbeiten, wodurch eine breite Anwendbarkeit der Software ermöglicht wird.

Anhang B

Verwendete Proben

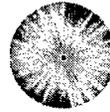
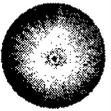
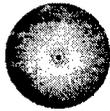
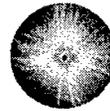
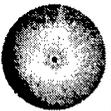
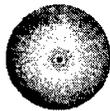
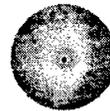
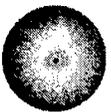
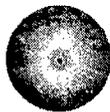
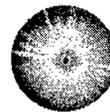
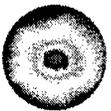
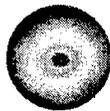
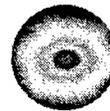
Polierparameter	5 min	10 min	15 min
6 μ m			
3 μ m			
1 μ m			
1/4 μ m			
1/4 μ m, OPS			

Abbildung B.1: Die Streulichtverteilungen aller fünfzehn für den Vergleich Streulicht-AFM verwendeten Stahlproben (Material: X5CrNi1810).

Anhang C

Merkmalskurven

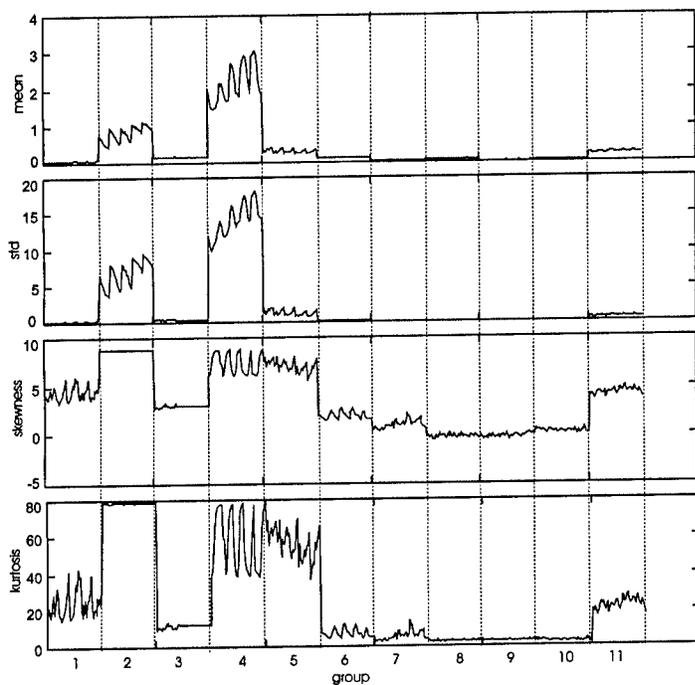


Abbildung C.1: Statistische Momente vs. Observationsnummer des Anlernsatzes.

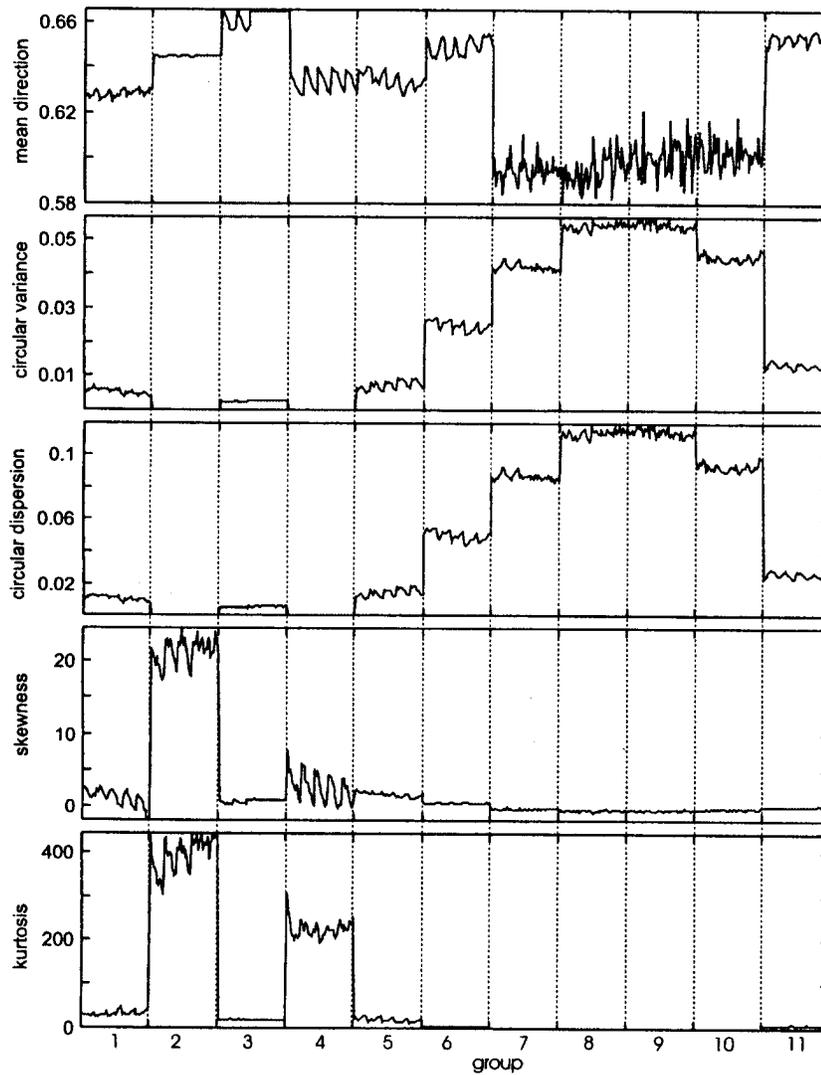


Abbildung C.2: Zirkulare Momente vs. Observationsnummer des Anlernsatzes.

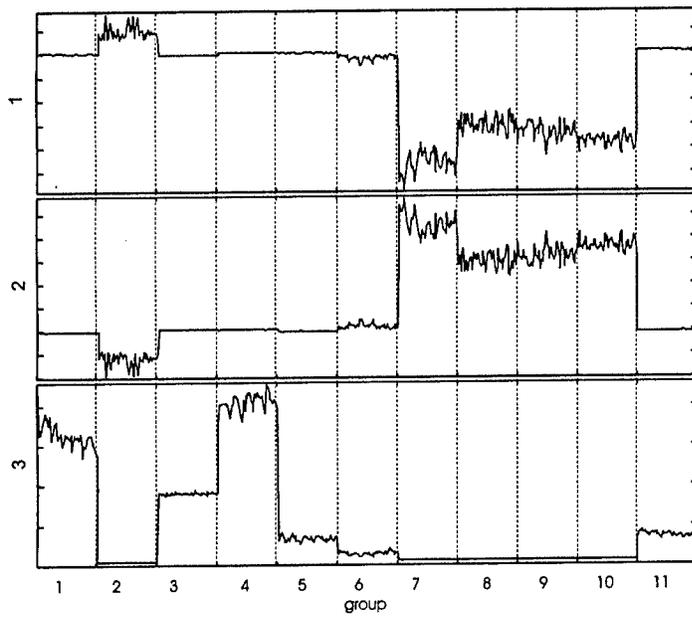


Abbildung C.3: Koeffizienten des Phong-Modells vs. Observationsnummer des Anlernsatzes.

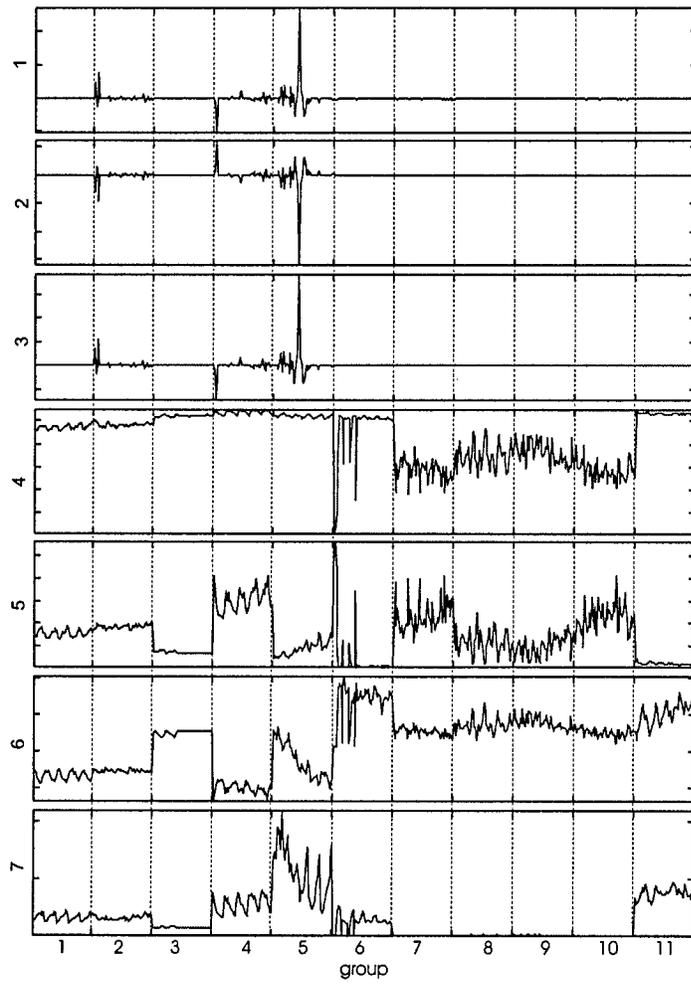


Abbildung C.4: Koeffizienten des *Meister*-Modells vs. Observationsnummer des Anlernsatzes.

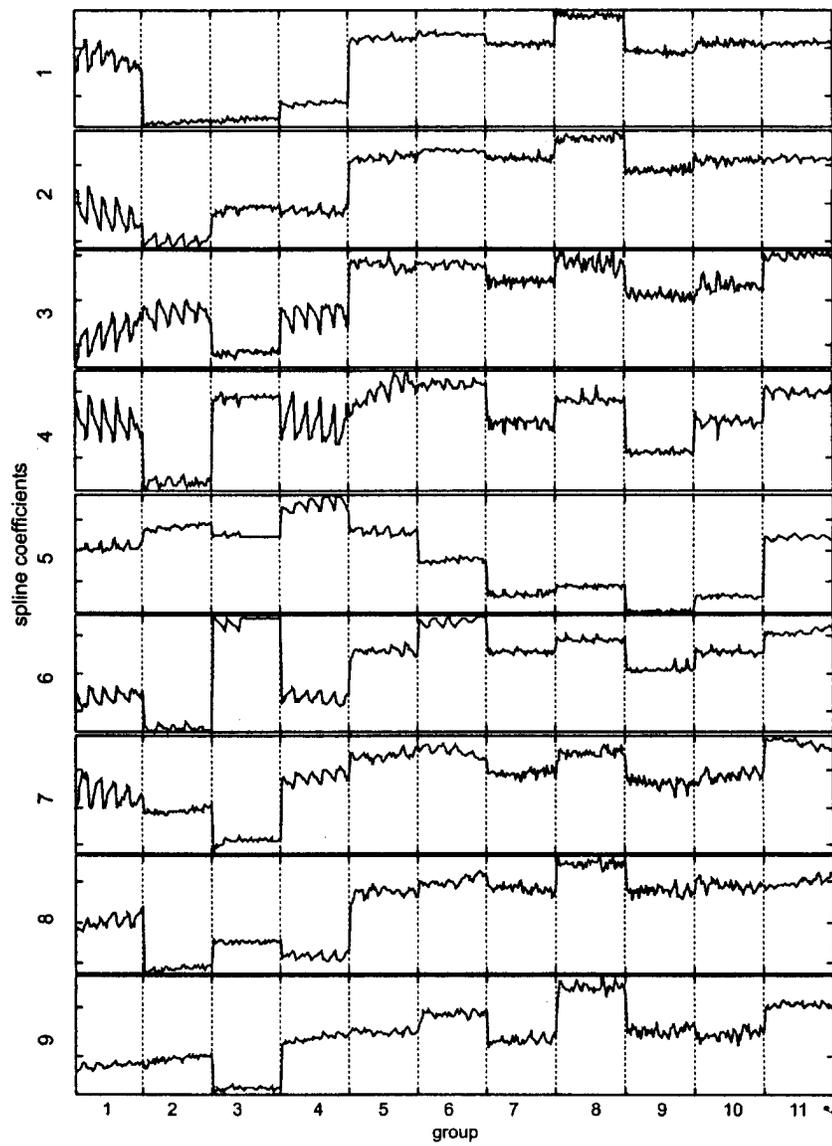


Abbildung C.5: Koeffizienten der Spline-Approximation vs. Observationsnummer des Anlernsatzes.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: André Kasper
Geburtsdatum: 7. April 1969
Geburtsort: Leipzig
Familienstand: verheiratet mit Frau Jana Kasper, geb. Linßner,
2 Kinder

Schul Ausbildung

1975 - 1985 Polytechnische Oberschule, Jena-Lobeda.

Berufliche Ausbildung

07/85 - 09/88 Berufsausbildung zum Feinmechaniker mit Abitur
an der Berufsschule Carl-Zeiss, Jena.

Hochschulstudium

10/88 - 04/94 Studium des Maschinenbaus an der
Friedrich Schiller Universität Jena,
Vertiefungsrichtung: Digitale Bildverarbeitung,
Abschluß: Diplom-Ingenieur.

Berufstätigkeit

05/85 - 07/85 Feinmechaniker Fa. Carl-Zeiss Jena.
04/94 - 12/99 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Institut für Automatisierungstechnik (IFA)
der Universität der Bundeswehr Hamburg.
seit 1/2000 Geschäftsführer der Fa. Automation Technology GmbH in Trittau.
